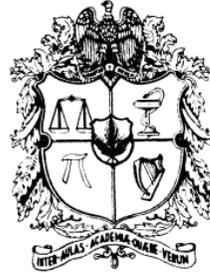


UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
Facultad de Ciencias

Maestría en Ciencias - Matemática Aplicada



Técnicas de solución numérica de la ecuación de
Difusión-Advección-Reacción para el estudio de dispersión de
contaminantes

T E S I S

para obtener el título de Magíster en Ciencias

Autor:

Carlos Humberto Galeano Uruña

Director:

Ph.D. MSc. I.M. Diego Alexander Garzón Alvarado

2009, BOGOTÁ-COLOMBIA

Tesis aprobada por la Facultad de Ciencias en cumplimiento de los requisitos exigidos para otorgar el título de:
Magíster en Ciencias

(Ph.D. MSc. I.M. Diego Alexander Garzón Alvarado)
Director de la tesis

(Nombre del jurado 1)
Jurado

(Nombre del jurado 2)
Jurado

(Nombre del jurado 3)
Jurado

Universidad Nacional de Colombia
Bogotá, D.C., Septiembre de 2009

Agradecimientos

El autor del presente trabajo agradece a quienes de alguna forma colaboraron con el desarrollo del mismo. En este corto párrafo hago un sencillo reconocimiento al Profesor Juan Miguel Mantilla y al Grupo de Modelado y Métodos Numéricos *GNUM* de la Universidad Nacional de Colombia, por su apoyo durante la construcción del modelo hidrodinámico; al profesor Carlos Eduardo Cubillos del Departamento de Ingeniería Civil y Agrícola de la Universidad Nacional de Colombia, por su colaboración para el uso del modelo a escala del tramo del río Magdalena; y de forma muy especial al director de este trabajo, profesor Diego Alexander Garzón, cuyo interés y apoyo académico fueron constantes durante todo el desarrollo de esta tesis.

Al Señor por darme la fuerza para superar los obstáculos e iluminar el camino que me han traído hasta aquí.

A mis padres, a mis hijos Jacobo y Jerónimo y a mi esposa Ana Milena, quienes son la motivación permanente de mi vida.

Cuando las leyes de la matemática se refieren a la realidad, no son ciertas; cuando son ciertas, no se refieren a la realidad.

Albert Einstein

Resumen

El presente trabajo analiza los problemas numéricos derivados de la incorporación de términos advectivos fuertes a la ecuación diferencial de Difusión-Reacción. Se consideran y examinan dos técnicas de estabilización de la solución por elementos finitos de esta ecuación: el método de Petrov-Galerkin en contracorriente (*SUPG*) y el método de Galerkin sobre líneas características. El análisis comparativo de estos dos métodos permitió evaluar la eficacia de cada uno en la eliminación de las oscilaciones artificiales, presentes en las aproximaciones realizadas con las formulaciones tradicionales de elementos finitos. Se concluye que para problemas altamente advectivos, las soluciones alcanzadas a través del método basado en líneas características no muestran un comportamiento muy diferente a las logradas con los métodos convencionales, a diferencia del método *SUPG* que logra, aún para altos valores en el número de Peclet, soluciones libres de oscilaciones espurias. Esta conclusión permitió el desarrollo de un algoritmo numérico, programado en lenguaje *FORTTRAN*, para el análisis del problema de dispersión de contaminantes en ríos. Este algoritmo fue validado a través de una prueba de dispersión de una solución salina, a lo largo de un modelo a escala de un tramo del río Magdalena, el cual se encuentra ubicado en el Laboratorio de Hidráulica de la Universidad Nacional de Colombia. La comparación de los resultados numéricos y experimentales, muestran la validez del modelo numérico desarrollado para puntos distantes a la zona de descarga de los contaminantes.

Palabras clave: *SUPG*, Petrov-Galerkin, Líneas características, Ecuación de Difusión-Advección-Reacción, estabilización, dispersión de contaminantes en ríos

Abstract

This work analyzes numerical problems of strong advective terms addition to the diffusion-reaction differential equation. Two different stabilization techniques for the solution by finite elements are used: Streamline Upwind Petrov Galerkin (*SUPG*) method and Galerkin over characteristic lines method. Comparative evaluations of these two methods permit identifying artificial oscillations removal efficacy of each one. Artificial oscillations appear by the approximations made by traditional finite elements method. It is concluding that for highly advective problems, final solutions from characteristic lines method does not show a different behavior from the ones obtained by traditional finite elements. On the other hand, *SUPG* reach, even for high Peclet numbers, solutions which are free of spurious oscillations. This conclusion leads to the development of a numerical algorithm, programmed in *FORTTRAN* language, for the problem analysis of contaminant dispersion in rivers. The algorithm was validated through a dispersion test, using a saline solution, in a branch of the Magdalena River scale model, located at the Hydraulics Laboratory in the National University of Colombia. Experimental and numerical results comparison, show the validity of the developed numerical model for points located far away from the contaminant discharge zone.

Keywords: *SUPG*, Petrov-Galerkin, Líneas características, Ecuación de Difusión-Advección-Reacción, estabilización, dispersión de contaminantes en ríos

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Índice de figuras	IX
1. Introducción	3
2. La ecuación de Difusión - Advección - Reacción y la dispersión de contaminantes en cuerpos de agua	7
2.1. La ecuación de Difusión-Advección-Reacción	7
2.2. Solución numérica de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción	11
2.3. Modelado de la dispersión de contaminantes en cuerpos de agua a través de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción	13
2.3.1. Modelado de manchas de hidrocarburos en el océano	16
2.3.2. Modelado de la dispersión de contaminantes en ríos	19
3. El método de Petrov-Galerkin en contracorriente (<i>SUPG</i>): planteamiento unidimensional	21
3.1. Planteamiento unidimensional de la solución por elementos finitos de la ecuación estacionaria de Difusión-Advección	21
3.2. Método de estabilización Streamline Upwind Petrov-Galerkin (<i>SUPG</i>)	25
3.3. Correspondencia del método <i>SUPG</i> con el método de las diferencias finitas	28
3.4. Planteamiento autoadjunto de la ecuación de residuos ponderados	29
3.5. Difusión artificial en el método <i>SUPG</i>	33
3.6. Planteamiento unidimensional de la solución por elementos finitos de la ecuación transitoria de Difusión-Advección	33
3.7. Efecto del término reactivo en el método <i>SUPG</i>	37
3.8. Ejemplos de aplicación del método <i>SUPG</i> en problemas unidimensionales	39

3.8.1.	Caso de estudio 1: Problema de Difusión-Advección con coeficientes constantes	39
3.8.2.	Caso de estudio 2: Problema de Difusión-Advección-Reacción con coeficientes constantes	40
3.8.3.	Caso de estudio 3: Problema de Difusión-Advección-Reacción con coeficientes variables	42
3.8.4.	Caso 4: Solución del modelo de Difusión-Advección-Reacción en estado transitorio	43
4.	Planteamiento multidimensional del método de Petrov-Galerkin en contracorriente	49
4.1.	Enfoque bidimensional de la difusión artificial dentro de la técnica <i>SUPG</i>	49
4.2.	Formulación de un elemento cuadrilátero bidimensional para la solución de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción	52
4.3.	Ejemplo de aplicación del método <i>SUPG</i> en un problema estacionario bidimensional	56
5.	Formulación del método de Galerkin sobre líneas características en la solución de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción	63
5.1.	Planteamiento unidimensional del método de líneas características	63
5.2.	Planteamiento unidimensional del método de Galerkin a lo largo de líneas características	64
5.3.	Correspondencia entre el método de Galerkin sobre líneas características y el método <i>SUPG</i>	69
5.4.	Planteamiento bidimensional del método Galerkin sobre líneas características	69
5.5.	Ejemplos de aplicación del método Galerkin sobre líneas características y comparación con el método <i>SUPG</i>	70
5.5.1.	Caso de estudio 1: Movimiento convectivo de una función gaussiana	70
5.5.2.	Caso de estudio 2: Movimiento convectivo de un frente de onda	72
6.	Aplicación del método <i>SUPG</i> en el modelado numérico del problema de dispersión de sustancias en cuerpos de agua	83
6.1.	Modelado de la dispersión de contaminantes en ríos	83
6.2.	Modelado de la dispersión de contaminantes en un tramo del río Magdalena	87
6.2.1.	Modelo hidrodinámico y campo de velocidades	88
6.2.2.	Modelo de dispersión	89
6.2.3.	Validación experimental del modelo numérico	90
7.	Conclusiones	101
7.1.	Aportes del trabajo	101
7.2.	Productos y publicaciones	102
7.3.	Trabajos futuros	103

Bibliografía

104

Índice de figuras

2.1. Patrón de distribución heterogéneo de una especie generado por la presencia de un término difusivo asociado con un fenómeno reactivo (<i>inestabilidad por difusión</i>).	9
2.2. Solución inestable alcanzada por un método numérico convencional.	11
2.3. Fenómenos físico-químicos asociados con el transporte y reacción de manchas de contaminantes en el agua.	14
2.4. Mancha de hidrocarburo emulsionada suspendida en la columna de agua. <i>Imagen tomada de [69]</i>	16
2.5. Derrame de aceite en la bahía de Taganga (Colombia) en abril de 2008.	18
2.6. Vertido de contaminantes en un río provenientes de un cauce tributario.	20
3.1. Funciones de forma lineales para un elemento unidimensional.	22
3.2. Función de peso original (izquierda) y perturbada por la adición de una cantidad constante $\frac{\alpha}{2}$ (derecha).	25
3.3. Funciones de forma lineales.	28
3.4. Comportamiento del α_{opt} y el α_{crit} para diferentes números de Peclet.	32
3.5. Efecto del coeficiente α en la definición del tipo del método numérico empleado.	32
3.6. Esquema de iteración seguido por el método Newton-Raphson.	36
3.7. Influencia del término reactivo en el valor de α_{crit}	39
3.8. Soluciones obtenidas para el caso de estudio 1 empleando el método de estabilización <i>Petrov-Galerkin</i> con 10 elementos (arriba-izq.), 20 elementos (arriba-der.) y 100 elementos (abajo).	41
3.9. Comportamiento del error absoluto acumulado porcentual alcanzado con el método <i>SUPG</i> para tres tipos diferentes de malla.	42
3.10. Soluciones obtenidas para el caso de estudio 2, empleando <i>Petrov-Galerkin</i> con 40 elementos y diferentes valores de coeficiente de perturbación α	43
3.11. Comportamiento del error absoluto acumulado porcentual alcanzado con el método <i>SUPG</i> para el caso de estudio 2, con diferentes valores de coeficiente de perturbación α	44

3.12. Comportamiento de los valores de Peclet, Damkohler, α_{crit} y P_{elim} a lo largo del dominio para el caso de estudio 3, con $h = 0,2$ (arriba), $h = 0,02$ (medio), $h = 0,002$ (abajo).	45
3.13. Soluciones obtenidas para el caso de estudio 3 empleando Petrov-Galerkin con 10 (arriba), 100 (medio) y 1000 elementos (abajo).	46
3.14. Solución transitoria alcanzada con el método Bubnov-Galerkin (izq.) y SUPG (der.) para el caso de estudio 6.	47
4.1. Línea de corriente al interior de un elemento bidimensional.	50
4.2. Elemento cuadrilátero de cuatro nodos (izq.) y coordenadas locales para un elemento cuadrilátero (der.).	53
4.3. Definición del dominio y condiciones de borde para el caso de estudio.	56
4.4. Solución numérica obtenida con Bubnov-Galerkin (a) y Petrov-Galerkin (b), para una malla de elementos rectangulares con $h = 0,01$	57
4.5. Comportamiento del número de Peclet al interior del dominio del problema para $h = 0,01$	58
4.6. Gráfica de convergencia de la norma de energía en términos del tamaño promedio de elemento.	59
4.7. Solución numérica obtenida con Bubnov-Galerkin (a) y Petrov-Galerkin (b), para una malla de elementos rectangulares con $h = 0,04$	59
4.8. Comportamiento del número de Peclet al interior del dominio del problema para $h = 0,04$	60
4.9. Solución numérica obtenida con Bubnov-Galerkin (a) y Petrov-Galerkin (b), para una malla de elementos rectangulares con $h = 0,09$	60
4.10. Comportamiento del número de Peclet al interior del dominio del problema para $h = 0,09$	61
5.1. Efecto del enfoque lagrangiano en el planteamiento de un problema de propagación de onda.	64
5.2. Movimiento del sistema coordenado para el método de Galerkin sobre líneas características.	66
5.3. Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 1 empleando $h = 0,01$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).	74
5.4. Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 1 empleando $h = 0,05$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).	75
5.5. Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 1 empleando $h = 0,1$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).	76
5.6. Gráfica de convergencia del error en norma de energía para las soluciones alcanzadas en el caso 1.	77
5.7. Distribución de las zonas de alta advección y difusión para el caso 2.	77

5.8. Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 2 empleando $h = 0,01$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).	78
5.9. Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 2 empleando $h = 0,05$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).	79
5.10. Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 2 empleando $h = 0,1$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).	80
5.11. Gráfica de convergencia del error en norma de energía para las soluciones alcanzadas en el caso 2.	81
6.1. Ubicación geográfica del tramo del río Magdalena analizado.	88
6.2. Toma del modelo físico del tramo del río Magdalena simulado (1).	89
6.3. Toma del modelo físico del tramo del río Magdalena simulado (2).	90
6.4. Toma del modelo físico del tramo del río Magdalena simulado (3).	91
6.5. Contornos del dominio y malla empleada para la solución del problema hidrodinámico y de dispersión.	92
6.6. Campo de velocidades simulado para el modelo físico del tramo del río Magdalena analizado.	93
6.7. Campo escalar de profundidades del modelo físico del tramo del río Magdalena analizado.	93
6.8. Evolución de la concentración del trazador en el tiempo.	95
6.9. Evolución de la concentración del trazador en el tiempo (Líneas de contorno).	97
6.10. Ubicación de los puntos de medición experimental empleados.	98
6.11. Comparación de los datos de concentración medidos experimentalmente y obtenidos a través de la solución numérica.	99

Introducción

La ecuación diferencial de Difusión-Advección-Reacción es usada ampliamente para el modelado de múltiples problemas de diferente naturaleza (física, química, económica, poblacional, etc.), aunque su solución numérica conlleva a algunos problemas asociados con el operador convectivo no-autoadjunto presente en la ecuación. La presencia de este término origina, en las aproximaciones numéricas desarrolladas con métodos convencionales, la aparición de oscilaciones no relacionadas con la naturaleza del fenómeno estudiado. La eliminación de estas oscilaciones, o estabilización de la solución, ha dado origen al desarrollo de múltiples técnicas o variaciones de los métodos convencionales, especialmente en diferencias finitas y elementos finitos.

Para el presente trabajo la ecuación de Difusión-Advección-Reacción es de especial interés para el estudio de la dispersión de contaminantes en cuerpos de agua. En el contexto nacional este problema se ha centrado en el análisis del comportamiento de manchas de hidrocarburos derramados en el océano, mediante algoritmos numéricos desarrollados, bajo enfoques Lagrangianos, por Institutos como el *COIH* (Centro de Investigaciones Oceanográficas e Hidrográficas) y el *CCCP* (Centro Control Contaminación del Pacífico). No obstante los importantes avances logrados alrededor de este tipo de problemas, el desarrollo de modelos para el análisis de dispersión de contaminantes en ríos es aún incipiente, pero de fundamental importancia ambiental si se consideran los múltiples accidentes que involucran el vertimiento de sustancias contaminantes en los cuerpos fluviales, tales como los ocurridos en el bajo Magdalena, en los años de 2006 y 2008, en donde canecas cargadas con cianuro cayeron accidentalmente al río, causando alarma en las poblaciones ribereñas de cuatro departamentos (Cesar, Bolívar, Atlántico y Magdalena).

El presente trabajo tiene por objetivo el análisis de dos técnicas de estabilización de la solución por elementos finitos de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción, así como el desarrollo de un algoritmo numérico para la solución del problema de dispersión de contaminantes en ríos.

En relación con las técnicas numéricas de estabilización, se estudiaron el método de Petrov-Galerkin en contracorriente y el método de Galerkin sobre líneas características, dos métodos de gran importancia pues constituyen la base para la formulación de técnicas numéricas estabilizadas para la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes. El análisis de estas técnicas permitió concluir sobre el mejor desempeño que tiene el método *SUPG*, en términos de estabilización de la solución. Los casos analizados, los cuales fueron seleccionados por la exigencia demandada de la técnica de estabilización, mostraron que aún para mallas gruesas, las cuales generan altos valores en el número de Peclet, el método *SUPG* lograba aproximaciones libres de oscilaciones, mientras que para estos mismos casos, el método basado en líneas características exhibía soluciones aún perturbadas, las cuales guardan mucha semejanza con las obtenidas por medio del método Bubnov-Galerkin convencional.

Por otro lado, es estudio detallado del método Petrov-Galerkin en contracorriente, permitió modificar las expresiones empleadas para el cálculo de los coeficientes de perturbación empleados, las cuales normalmente son deducidas de la ecuación de Difusión-Advección, es decir ignorando el efecto del término reactivo. Las nuevas expresiones encontradas para el cálculo del coeficiente de perturbación permiten adicionar, de acuerdo a la magnitud de los números adimensionales de Peclet y Damköhler, una cantidad de difusión numérica adecuada, de forma que se logran eliminar las oscilaciones espurias sin perjudicar la exactitud del método.

El algoritmo de estabilización desarrollado, fue empleado para el análisis del problema de la dispersión de contaminantes en ríos, el cual incorpora los términos de dispersión longitudinal, transversal, transporte (advección) y evaporación de la sustancia contaminante (como término reactivo). La validación de los resultados numéricos se realizó a través de un modelo experimental desarrollado en el Laboratorio de Hidráulica de la Universidad Nacional de Colombia. El algoritmo numérico construido mostró una buena exactitud, excepto en las zonas próximas a los puntos de vertimiento de los contaminantes, aunque una amplia dependencia de los valores empíricos de los coeficientes de dispersión empleados.

Este presente documento se estructura de la siguiente manera: en el segundo capítulo se hace una revisión del estado del arte de los métodos de estabilización de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción, así como de los estudios desarrollados para el análisis del problema de la dispersión de contaminantes en cuerpos de agua. El tercer capítulo se enfoca en el planteamiento unidimensional del método *SUPG*, considerando tanto el caso estacionario como transitorio del problema de Difusión-Advección-Reacción. El planteamiento de un término de difusión artificial, permite la ampliación de este método a dos o más dimensiones espaciales, lo cual se presenta en el cuarto capítulo. El quinto capítulo plantea y analiza el método de Galerkin sobre líneas características, y presenta dos casos de estudio que permiten la comparación de las capacidades de estabilización de los dos métodos estudiados, así como su exactitud. En el sexto capítulo se plantea el problema de la dispersión de contaminan-

tes solubles en cuerpos de agua, a través de la ecuación de Dispersión-Advección-Reacción, considerando el caso hipotético del derrame de una sustancia contaminante en el río Magdalena, a la altura del municipio de Calamar. En la parte final del documento se presentan las conclusiones, así como una breve discusión sobre los trabajos futuros derivados de esta tesis y los productos generados a partir del trabajo desarrollado.

Capítulo 2

La ecuación de Difusión - Advección - Reacción y la dispersión de contaminantes en cuerpos de agua

2.1. La ecuación de Difusión-Advección-Reacción

Muchos problemas físicos pueden ser modelados analizando el balance de tres fenómenos: la difusión, la advección y la reacción [41]. El primero se define como la dispersión de las especies involucradas en el proceso a lo largo del dominio físico del problema. La advección se relaciona con el transporte de especies debido a la presencia de campos de velocidad. Y por último, la reacción es el proceso de interacción mediante la cual se generan o se consumen las especies involucradas en el fenómeno.

El problema de la Difusión-Advección-Reacción, consiste en la determinación de una función de campo escalar $\phi(\vec{x}, t)$, la cual debe satisfacer la ecuación diferencial 2.1.1:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot k \vec{\nabla}(\phi) + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \phi + s\phi = F(\vec{x}) \quad \text{sobre } \Omega \quad (2.1.1)$$

así como unas condiciones de contorno definidas por las expresiones 2.1.2 y 2.1.3:

$$\phi(\vec{x}) = g(\vec{x}) \quad \text{sobre } \Gamma_\phi \quad (2.1.2)$$

$$\vec{\nabla}(\phi) = h(\vec{x}) \quad \text{sobre } \Gamma_\nabla \quad (2.1.3)$$

donde k es el coeficiente difusivo, \vec{u} es el campo de velocidad asociado al proceso advectivo, s es el coeficiente fuente ($s > 0$ implica producción y $s < 0$ significa disipación), $F(\vec{x})$ es

una función de generación, $g(\vec{x})$ es la función que define el valor del campo escalar sobre la frontera y $h(\vec{x})$ es la función que define el valor del flujo sobre la frontera.

La simplificación de esta expresión permite la obtención de ecuaciones específicas de amplio uso en diferentes campos de la física, tales como:

- Ecuación de Helmholtz: empleada en los problemas de acústica, electromagnetismo y sismología, la cual se obtiene considerando el término de producción ($s > 0$) y eliminando el término advectivo ($\vec{u} = 0$) [6].
- Ecuación de Advección-Difusión ($s = 0$): utilizada ampliamente en problemas de dispersión de gases contaminantes altamente estables, producidos por la combustión de alguna sustancia [93].
- Ecuación de Advección-Reacción ($k = 0$): usada en el modelado de dispersión de contaminantes acuíferos en aguas con alta velocidad, en donde el efecto difusivo no guarda la misma escala de tiempo que los otros dos fenómenos (advección-reacción) [52].
- Ecuación de Difusión-Reacción ($\vec{u} = 0$): Un fenómeno regido por los procesos de reacción y difusión, se caracteriza por la presencia de distribuciones espacio-temporales de las especies involucradas, esta distribución se denomina comúnmente patrón. Turing [97] definió las condiciones para las cuales un proceso reactivo en equilibrio, puede ser inestabilizado por la presencia de un término difusivo, generándose así unos patrones espaciales heterogéneos, denominados *inestabilidades por difusión* o *inestabilidades de Turing*, como el mostrado en la Figura 2.1. Esta ecuación tiene muy diversas aplicaciones en problemas físico-químicos, como en los mecanismos de morfogénesis [41], en donde las moléculas difunden a través de los tejidos y reaccionan con otras sustancias directamente y por señalización a través de las células; también en la formación de manchas en la piel de algunos animales [66; 71; 56; 84; 68], el crecimiento de tumores [17], la distribución de poblaciones de animales [105], entre otra muchas aplicaciones.

Desde el punto de vista de los campos de estudio, esta ecuación o sistemas de ecuaciones diferenciales de Difusión-Advección-Reacción, se emplean para el estudio de problemas en campos como en:

- La dinámica de fluidos, a través de la linealización de las ecuaciones de Navier-Stokes 2.1.4, como se propone en [113],

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla \cdot \nabla \vec{u} + f \quad (2.1.4)$$

en la ecuación no lineal de conservación de cantidad de movimiento 2.1.4, \vec{u} representa el campo de velocidad del fluido, p el campo escalar de presiones, μ la viscosidad, ρ la densidad y f define un campo de fuerzas volumétricas.

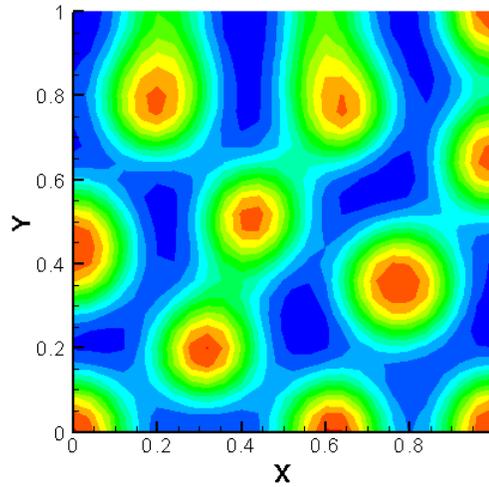


Figura 2.1: Patrón de distribución heterogéneo de una especie generado por la presencia de un término difusivo asociado con un fenómeno reactivo (*inestabilidad por difusión*).

- Las matemáticas financieras, empleando la ecuación diferencial de Black-Scholes 2.1.5, como se plantea en [87],

$$\frac{\partial V(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\sigma^2 x^2 \frac{\partial^2 V(x, t)}{\partial x^2} + rx \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} - rV = 0 \quad (2.1.5)$$

en esta última ecuación, $V(x, t)$ es el valor de la opción de comprar o de vender un bien financiero con el precio x en el momento t , la constante real σ se llama volatilidad y la constante r define el riesgo de la inversión.

- La acústica, empleando la ecuación de Helmholtz 2.1.6, tal como en [6],

$$\nabla \cdot \nabla A(\vec{x}) + k^2 A(\vec{x}) = \Phi(\vec{x}) \quad (2.1.6)$$

donde A representa el campo escalar de amplitudes de oscilación, Φ es una función de generación y k es el número de onda.

- La transferencia de calor, como en los trabajos [46; 5; 61],
- La ingeniería biomédica, por ejemplo para la simulación de los procesos de coagulación y regeneración ósea, entre otros, tal como se plantea en [65; 39; 31]. Para el caso de regeneración ósea se emplea el modelo de reacción de Schnakenberg, resultando el sistema de ecuaciones 2.1.7.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma(\alpha - u + u^2v) + \nabla \cdot \nabla u - \vec{a} \cdot \nabla u \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \gamma(\beta - u^2v) + \nabla \cdot d \nabla v - \vec{a} \cdot \nabla v\end{aligned}\tag{2.1.7}$$

en este modelo u y v representan, respectivamente, la concentración de las hormonas PTHrP (Hormona Paratiroidea Péptida Relacionada) y Ihh (Hormona Indian Hedgehog), α y β son constantes positivas que definen la producción de u y v , mientras que el término de catálisis no-lineal u^2v define la activación de u y el consumo de u . La constante d define la relación entre los coeficientes de difusión de cada especie.

- La dinámica de poblaciones, como por ejemplo en el estudio de dispersión de poblaciones e información genética [79], o en la determinación de la distribución espacio-temporal de especies (depredador y presa) en un ecosistema. empleando el sistema de ecuaciones de Lotka-Volterra modificado 2.1.8, tal como se plantea en [104; 9; 82].

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial \tau} &= S(U) - F(U, V) + \nabla \cdot D_u \nabla U \\ \frac{\partial V}{\partial \tau} &= \eta F(U, V) - M(V) + \nabla \cdot D_v \nabla V\end{aligned}\tag{2.1.8}$$

En esta última expresión, U representan la densidad de biomasa de la especie presa y V es la densidad de biomasa de depredadores. Las funciones S y M determinan la dinámica intrínseca de cada población, mientras que F es la función de depredación. El coeficiente η denota la fracción de biomasa de presas que puede convertirse en biomasa de depredadores. D_u y D_v son los coeficientes de difusión que definen la dispersión espacial de las especies estudiadas.

- Otros campos de aplicación se encuentran en: el electromagnetismo [80], la física de semiconductores [8], la ingeniería de materiales [58], la química [106], la biología [25; 81; 67; 34], la astrofísica [72] y la predicción y control de incendios [30].

Las soluciones de la ecuación 2.1.1 exhibe dos formas generales. La primera se caracteriza por un régimen exponencial (creciente o decreciente), alcanzado cuando las raíces de la ecuación característica son reales, es decir, cuando el discriminante se hace mayor o igual que cero $|\vec{u}|^2 - 4sk$. La segunda se denomina generalmente régimen de propagación y se caracteriza por un comportamiento sinusoidal modulado por una función exponencial. Para casos de coeficientes variables en la ecuación, se pueden alcanzar soluciones que varían su comportamiento de una zona a otra.

2.2. Solución numérica de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción

Además de la enorme utilidad para el estudio de fenómenos físicos, algunas formas de la expresión 2.1.1 se caracterizan por la dificultad en la implementación de soluciones numéricas y el requerimiento de técnicas especiales para construir una aproximación.

En numerosos casos las soluciones numéricas implementadas para el desarrollo de este tipo de ecuaciones presentan oscilaciones falsas que no se ajustan al comportamiento real del fenómeno modelado, de modo que el desarrollo de técnicas numéricas exactas y confiables para el desarrollo de este tipo de expresiones, se ha convertido en un campo de permanente investigación en los últimos treinta años. La Figura 2.2 muestra la solución analítica a una ecuación de Difusión-Advección-Reacción unidimensional, junto con una aproximación alcanzada con un planteamiento por diferencia finitas centradas.

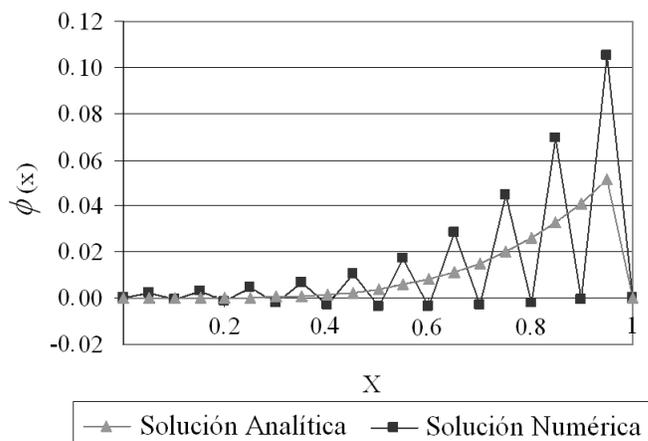


Figura 2.2: Solución inestable alcanzada por un método numérico convencional.

La solución del problema de Difusión-Advección-Reacción empleando una formulación convencional de elementos finitos (comúnmente denominada formulación de *Bubnov-Galerkin*) lleva frecuentemente a soluciones poco exactas o con oscilaciones erróneas (falsas), especialmente en las zonas aguas abajo donde se presentan fuertes variaciones del campo escalar, tal como en los problemas de capa límite [112], exceptuando los casos en los que el término relacionado con la difusión predomina numéricamente sobre los demás (también denominados problemas de difusión dominante). La presencia de estas oscilaciones está relacionada con los valores de los coeficientes de la ecuación, es decir con la naturaleza del fenómeno predominante. El método de Galerkin presenta significativa divergencia, con respecto a la solución real, para todos los casos en los que se cumple la condición [90]:

$$P_e = \frac{u * h}{2 * k} > 1 \quad (2.2.9)$$

donde P_e se denomina número de Peclet y h es la longitud característica del elemento. Esta condición define todos los casos en donde el fenómeno advectivo predomina sobre el difusivo. De acuerdo con lo anterior, una forma de estabilizar la solución puede ser reduciendo la longitud característica del elemento, disminuyendo por tanto el número de P_e . Sin embargo, para casos con campos advectivos fuertes esta técnica puede no ser la más apropiada desde el punto de vista de costo computacional. Numéricamente se observa como para números P_e pequeños, la matriz de rigidez, alcanzada con la formulación Bubnov-Galerkin, tiende a ser simétrica, por tanto los valores propios discretos de la misma son reales y la solución del problema se puede interpretar como la minimización de un funcional. Para casos con números de P_e elevados, estos valores propios son imaginarios (en su mayoría), lo cual está asociado con la fuerte asimetría en la matriz de rigidez, así como con la imposibilidad de derivar el problema desde un principio variacional.

La eliminación de estas oscilaciones (estabilización de la solución), se logra regresando el carácter simétrico a la matriz de rigidez, lo cual puede ser alcanzado empleando diversos métodos, entre los cuales se puede citar: el método de cálculo finito [73], el método de paso fraccional [18], el método de mínimos cuadrados de Galerkin [50], el método de las líneas de características [112; 110], y el método Petrov-Galerkin de contracorriente [108]. Estos dos últimos son los métodos usados más ampliamente para la estabilización numérica de las soluciones de la ecuación de difusión-advección-reacción.

El método Petrov-Galerkin en contracorriente se basan en la modificación de la función de peso de la ecuación de residuos ponderados, adicionando una función de perturbación que logra estabilizar el método, ponderando con mayor peso la información proveniente de los nodos ubicados aguas arriba (de ahí el término *Streamline Upwind*). La primera referencia al uso de estas funciones de peso modificadas aparece en 1975 [108], las cuales más tarde fueron empleadas formalmente por Christie [19] y Zienkiewicz [109]. Posteriormente Hughes [47], retoma el fundamento del método streamline upwind para problemas de convección dominante. Este método fue reformulado en 1982 por Brooks-Hughes [15], quienes presentan una formulación general del método SUPG como una forma de aproximar la solución del problema generalizado de Stokes. El método SUPG es adoptado en 1984 por Johnson [54] para la solución de problemas que involucran ecuaciones diferenciales hiperbólicas. En 1986 Hughes [48], asocia el método SUPG con el cumplimiento de las condiciones de Babuska-Brezzi en los problemas de dinámica de fluidos. Posteriormente, Hughes [49] emplea los mínimos cuadrados para la obtención de la función de perturbación adecuada en la estabilización de los elementos finitos (Streamline Petrov-Galerkin con mínimos cuadrados, GLS). Franca [33], emplea el método SUPG a la solución de problemas advectivos-difusivos. En 1993 Baiocchi [7] adiciona el empleo de funciones burbuja para el enriquecimiento de las funciones polinomiales, en tanto que Harari [45] en 1994, incluye técnicas de optimización para mejorar el desempeño de los métodos de estabilización, específicamente en problemas

de advección-difusión-producción. En 1996 Russo [83] aplica la estabilización con funciones burbuja en la solución de la ecuación linealizada de Navier-Stokes, mientras que Codina [22] en 1998 presenta una comparación de técnicas de estabilización de elementos finitos para la solución del problema de advección-difusión-reacción. Un nuevo método para la solución de este tipo de problemas, es presentado por Cockburn [21], en donde se hace uso de un método de Galerkin empleando funciones discontinuas, el cual brinda la posibilidad de paralelizar los algoritmos desarrollados, emplear mallas irregulares con nodos no necesariamente coincidentes y emplear funciones polinomiales de diferente grado para diferentes elementos, lo cual permite el desarrollo de métodos adaptativos. Araya [3; 4] incorpora al método de estabilización clásico SUPG, un estimador de error a posteriori, que permite la implementación de técnicas de mallado adaptativo. Por último, resulta interesante mencionar el trabajo de Xin [103], el cual emplea un término de viscosidad artificial, que permite la estabilización de la formulación del método de los elementos finitos para la solución de problemas hiperbólicos obtenidos a partir de teoremas de conservación.

2.3. Modelado de la dispersión de contaminantes en cuerpos de agua a través de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción

Modelar y predecir la forma como se transportan y reaccionan sustancias vertidas en cuerpos de agua es un campo de estudio de involucra e interesa a diferentes disciplinas, tales como la: oceanografía, biología marina, ingeniería, matemáticas aplicadas, química, ecología, etc. Desde el punto de vista del interés, el conocimiento de la forma como se dispersa, mueve y reacciona la sustancia vertida en el agua, permite trazar anticipadamente la trayectoria que llevará la mancha de contaminante [98], conocer los tiempos que tardará la sustancia contaminante en llegar a una costa o a una población cercana [35; 64], evaluar con antelación el impacto de la sustancia en un ecosistema o asentamiento humano [92], planear estrategias de contención de la mancha, seleccionar los mecanismos de recolección de la sustancia y diseñar estrategias de descontaminación [94; 74].

Desarrollar un modelo de predicción de este fenómeno no es sencillo e involucra muchas variables tales como: las propiedades físico-químicas de la sustancia derramada, el tiempo transcurrido, la velocidad de la corriente, la velocidad del viento, el oleaje, turbulencia o agitación del agua, las mareas, etc., así como muchos fenómenos físicos químicos y biológicos, como por ejemplo: difusión, dispersión, advección, escurrimiento, evaporación, emulsificación, precipitación, biodegradación, fotólisis y disolución, entre otros. Considerando adicionalmente, que en muchas ocasiones las características propias de cada problema (en cuanto a magnitudes de las variables involucradas), definen los fenómenos relevantes en el comportamiento de la mancha. En la Figura 2.3 se ilustran algunos de estos fenómenos, los

cuales se definen brevemente a continuación:

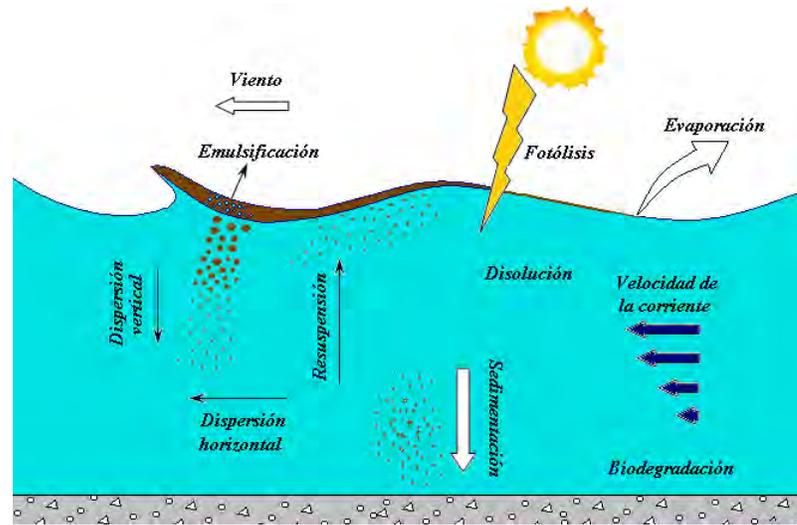


Figura 2.3: Fenómenos físico-químicos asociados con el transporte y reacción de manchas de contaminantes en el agua.

- Esgurrimento: Desde el mismo momento del derrame, la mancha inicia un proceso de dispersión mecánica y reducción de espesor de la película de contaminante, el cual es regido por las fuerzas viscosas, gravitacionales y de tensión superficial. La determinación del espesor de la mancha resulta en extremo útil para la determinación de las velocidades de evaporación, así como para evaluar la pertinencia de las técnicas de control del derrame y de los impactos del mismo sobre el medio [77]. Este proceso al igual que la dispersión, difusión, evaporación y emulsificación, es muy importante durante las etapas tempranas del derrame.
- Difusión molecular: Este fenómeno se refiere al movimiento de una sustancia desde una zona de alta concentración hasta una zona de menor concentración, debido al efecto del movimiento browniano de las moléculas de la sustancia difundida, el que comunmente se modela a través de las leyes de Fick.
- Difusión turbulenta: El flujo turbulento en el fluido de transporte actua rompiendo la mancha en muchas partículas. Inicialmente las fluctuaciones turbulentas de mayor tamaño deforman y rompen la película de contaminante en fracciones, las cuales son divididas a su vez por fluctuaciones de una menor escala, generando partículas aún más pequeños. Este proceso se repite en escalas cada vez más pequeñas, hasta que la difusión molecular termina el proceso.
- Dispersión: Debido a los gradientes de velocidad en el fluido que transporta la mancha, esta se deforma y extiende tanto en la dirección de la corriente, como en la dirección

transversal al flujo. Aunque este fenómeno no es de naturaleza molecular, como lo es la difusión, normalmente es modelado con una expresión análoga a la segunda ley de Fick, empleando un coeficiente de dispersión varios ordenes de magnitud mayor al de difusión.

- **Dispersión vertical:** El efecto de las corrientes turbulentas fraccionan la película de contaminante, generando partículas de diferentes tamaños. Las partículas de menor tamaño permanecen dispersas en suspensión en diferentes niveles de la columna de agua, en tanto que las partículas de mayor tamaño regresan a la superficie.
- **Advección:** Se trata del fenómeno de transporte de la mancha de contaminante asociado con las velocidades del cuerpo de agua, así como de las corrientes de viento, el oleaje y las mareas.
- **Evaporación:** El crudo es una sustancia compuesta por cadenas de hidrocarburo de diferentes pesos. Los compuestos más livianos, es decir, las cadenas más cortas y normalmente las de mayor poder contaminante (como los aromáticos), suelen evaporarse durante las primeras horas del derrame, tal como el queroseno y la gasolina, mientras que los compuestos parafínicos harán parte de la mancha por mucho más tiempo.
- **Emulsificación:** Una emulsión es la combinación de dos fluidos, en la cual uno permanece suspendido dentro del otro. En algunos casos, como en derrames de hidrocarburos, la mancha de contaminante forma emulsiones al atrapar partículas de agua en su interior. Estas emulsiones cambian las propiedades de la mancha en cuanto a su densidad y viscosidad, modificando otros fenómenos como el escurrimiento, la sedimentación y la evaporación.
- **Sedimentación:** Producto de la dispersión vertical, la evaporación y la emulsificación, la mancha de contaminante se fracciona en partes que pueden tener un peso específico igual o menor que el del agua. Las partículas con un peso específico menor se sumergen, precipitan y acumulan en el fondo.
- **Biodegradación y Fotólisis:** La biodegradación es el proceso de aprovechamiento del contaminante, por parte de microorganismos presentes en el medio, los cuales a menudo son capaces de procesar y fraccionar esta sustancia y convertirla en otra soluble con el agua. Por otra parte, la fotólisis se relaciona con el proceso de oxidación-reducción de la sustancia de contaminante. En el caso de hidrocarburos, este proceso rompe las largas cadenas moleculares, en presencia de luz solar y el oxígeno del medio, generando compuestos más livianos y solubles denominados alquitranes. Estos dos fenómenos son extremadamente lentos y requieren mucho tiempo para completarse, de modo que normalmente son ignorados dentro de los modelos que buscan predecir el comportamiento y trayectoria de manchas de contaminantes, pues estas simulaciones manejan escalas de tiempo mucho más cortas.



Figura 2.4: Mancha de hidrocarburo emulsionada suspendida en la columna de agua. *Imagen tomada de [69]*

2.3.1. Modelado de manchas de hidrocarburos en el océano

Las actividades de extracción de crudo en alta mar, así como el transporte de hidrocarburos en buques-tanque, generan frecuentemente derrames de estos contaminantes en los mares y océanos. De acuerdo con [20], la mitad del crudo producido en el mundo es transportado por en el mar, en tanto que una significativa cantidad de derrames ocurren durante las operaciones de cargue, por choques o encallamientos de buques. Y, aunque durante los últimos años la cantidad de derrames de grandes volúmenes de hidrocarburos se ha reducido (la cantidad de derrames superiores a las 700 toneladas pasó de 25.2 derrames por año en la década de los 70's, a solo 3.8 derrames por año entre los años 2000 a 2004 [64]), los niveles de derrames de menor volumen hace preocupante la situación de contaminación de múltiples zonas, especialmente las más cercanas a las rutas de transporte o a las plataformas de producción [98], resultando afectados los ecosistemas, las actividades pesqueras, turísticas y de suministro de agua.

Alrededor del problema del comportamiento de manchas de hidrocarburos derramados en cuerpos oceánicos, se encuentran dos tipos de investigaciones: las primeras se orientan al estudio y modelado de los fenómenos físico-químicos involucrados, tales como la advección, la difusión, la dispersión, el escurrimiento, la evaporación, la sedimentación, etc. En tanto que el segundo grupo de trabajos se dedican a desarrollar diferentes tipos de algoritmos numéricos que acoplan los fenómenos de transporte de las manchas de hidrocarburo con su comportamiento físico-químico, permitiendo predecir trayectorias, analizar el impacto y ayudar a seleccionar los mecanismos para el control de la mancha. Resulta importante aclarar que, considerando las amplias limitaciones con las que se conocen los procesos físico-químicos involucrados en la evolución de una mancha de hidrocarburo, los modelos

resultantes deben ser analizados de forma crítica y con alguna reserva [101]. Este último grupo de desarrollos se enmarcan dentro de los objetivos perseguidos por trabajo aquí presentado y por tanto se discutirán brevemente.

Aunque muchos de modelos desarrollados para el estudio de la calidad de agua y de movimiento de contaminantes en cuerpos de agua, se plantean bajo enfoques Eulerianos, es muy común y casi general que los problemas asociados con derrames de hidrocarburos sean analizados desde una óptica Lagrangiana, empleando la técnica de partículas trazadoras. El uso de este enfoque, logra analizar el problema de difusión y dispersión de la mancha empleando las técnicas *random-walking-particle*, lo cual evita los problemas de difusión numérica, asociados a los altos números de Peclet [13] normalmente presentes en estos problemas, así mismo permiten incorporar de manera natural fenómenos como la dispersión vertical y la sedimentación. No obstante, estos modelos implican un alto costo computacional debido a la gran cantidad de partículas que es necesario involucrar para lograr resultados aceptablemente exactos. De acuerdo con [43], considerando diámetros de partículas cercanos a $1000\mu m$, cada m^3 de hidrocarburo derramado requerirá aproximadamente $1,9 \times 10^9$ partículas para su análisis.

Dentro de estos trabajos se encuentran modelos Lagrangianos bidimensionales simples para la predicción de la trayectoria de la mancha, (como en [98; 64; 77; 29; 16]), así como otros modelos que incorporan movimiento tridimensional en las partículas trazadoras, con lo cual adicionan al estudio los términos de dispersión vertical y sedimentación ([13; 16; 57; 100]).

Aunque en mucha menor cantidad, también se encuentran modelos con un enfoque Euleriano, que solucionan el problema discretizando el dominio con una malla fija y resolviendo la ecuación de Difusión(Dispersión)-Advección-Reacción por diferencias finitas [94], elementos finitos o alguna otra técnica numérica. Este enfoque tiene la ventaja de permitir un acople de estos modelos de transporte de contaminante, con los correspondientes modelos hidrodinámicos desarrollados a través de las ecuaciones de Navier-Stokes. Sin embargo, las formulaciones numéricas básicas en estos casos incorporan difusión numérica y requieren técnicas especiales de estabilización, siendo este el objetivo central del presente trabajo.

Aprovechando las virtudes de los dos enfoques mencionados anteriormente (Lagrangiano y Euleriano), algunos autores han desarrollado modelos combinados [43]. Los métodos euleriano-lagrangiano han sido desarrollados para problemas de advección dominante y desacoplan el fenómeno difusivo y advectivo, solucionando cada ecuación resultante por separado. Estos métodos, aunque estables y libres de oscilaciones, reportan errores en las zonas de alto gradiente, como por ejemplo en las zonas de alta concentración de hidrocarburo durante las primeras horas del evento.

En todos los desarrollos mencionados anteriormente, con excepción de [29], los datos de clima, así como los hidrodinámicos, provienen de macro-modelos como el *POM* (Princeton Ocean Model) o el *UKMO* (United Kingdom Meteorological Office). Estos algoritmos pro-

porcionan los campos de corriente, oleaje, temperatura superficial, nivel de las mareas y demás datos requeridos para evaluar el comportamiento de la mancha de hidrocarburo.

La cercanía de Colombia a Venezuela, uno de los mayores productores de petróleo del mundo, así como al alto tráfico de buques cisterna en las zonas portuarias, hace a Colombia una zona de alto riesgo de derrames (ver Figura 2.5). A nivel nacional, el trabajo sobre el modelado de dispersión de manchas de hidrocarburos también ha sido intenso. Institutos como el *CIOH* (Centro de Investigaciones Oceanográficas e Hidrográficas) y el *CCCP* (Centro Control Contaminación del Pacífico) han estudiado esta problemática y han desarrollado modelos para predecir el comportamiento de estas manchas en las zonas de mayor riesgo, como: el golfo de Morrosquillo, y las bahías de Santa Marta, Cartagena y Tumaco. Los primeros modelos de derrames elaborados por el *CIOH* en conjunto con Colciencias, consistieron en formulaciones Lagrangianas bidimensionales, acoplados con el modelo climático *POM*, y enfocados en la costa caribe colombiana [62]. Posteriormente estos modelos fueron refinados y se construyeron planteamientos Lagrangianos tridimensionales, los cuales se acoplaron al modelo meteorológico *UKMO* alimentado con un sistema de asimilación de datos provenientes de un radiómetro de alta resolución [63]. Este esquema fue empleado para predicción de trayectorias de la mancha de hidrocarburo durante las emergencias de los buques *ALMA ATA* (Santa Marta, Agosto de 2003) y *B/T SAETTA* (Cartagena, Abril de 2005). De forma análoga, el *CCCP* ha trabajado en la construcción de modelos para la evaluación del riesgo de accidentes de derrames de hidrocarburo en la bahía de Tumaco [92].



Figura 2.5: Derrame de aceite en la bahía de Taganga (Colombia) en abril de 2008. Foto tomada de www.elheraldo.com.co

2.3.2. Modelado de la dispersión de contaminantes en ríos

El creciente interés en la preservación de la calidad del agua y en los ecosistemas que se desarrollan alrededor de este medio, ha involucrado tanto mares y océanos, como cuerpos de agua al interior como ríos y lagos. El estudio de calidad de agua en ríos implica en muchos casos el análisis de la dispersión de contaminantes vertidos por afluentes (ver Figura 2.6) [59], o derramados accidentalmente en algún punto del trayecto [35]. En cualquiera de estos casos, el modelado del fenómeno se realiza empleando la ecuación de Difusión(Dispersión)-Advección-Reacción, en su forma unidimensional, bidimensional o tridimensionalmente, siendo más comunes los casos donde se implican una o dos dimensiones espaciales, como en: [35; 59; 27; 2; 53; 95; 26].

Los modelos unidimensionales, se emplean frecuente para la determinación de los tiempos de llegada de la mancha del contaminante a un determinado punto del río o asentamiento humano, como en [35]. El estudio de este tipo de modelos permite el desarrollo de soluciones analíticas, que se pueden calibrar fácilmente a partir datos experimentales (pruebas con trazadores) y técnicas estadísticas o de optimización, como en [27; 2] y [91]. Aunque muchos modelos asumen condiciones homogéneas durante el trazado del río, es decir, valores de velocidad y coeficientes de dispersión longitudinal constantes, una mejor aproximación debe considerar las variaciones que estos términos pueden tener a lo largo del cauce. [53] formula una solución analítica para la ecuación unidimensional de Dispersión-Advección, asumiendo coeficientes variables en el tiempo y en el espacio dentro de la ecuación diferencial, los cuales pueden ser tratados como cantidades constantes luego de dos transformaciones que introducen nuevas variables de espacio y tiempo.

Otra ventaja de la sencillez de los modelos unidimensionales es que permiten incorporar al problema, algunos otros fenómenos tales como la deposición de residuos sobre los lechos de los ríos [95], evaluar zonas y tiempos de estancamiento de las sustancias vertidas [27], e incluso analizar sistemas de descontaminación, acoplando a la ecuación de dispersión de contaminantes con una ecuación de dispersión y transporte de oxígeno disuelto, como en [74].

Por su parte, los modelos bidimensionales permiten, en caso de ríos de gran tamaño, conocer la dispersión transversal de las sustancias vertidas, así como la trayectoria bidimensional de la mancha en la superficie del río, como en [59; 26].

Independientemente del número de dimensiones involucradas en el modelo, uno de los principales problemas en el uso de los modelos de dispersión de sustancias en ríos, consiste en la determinación de los coeficientes de dispersión, tanto longitudinal como transversal. Muchos estudios han sido dedicados a plantear expresiones empíricas que permitan relacionar la magnitud de estos coeficientes con parámetros propios del río, tales como la velocidad, profundidad, ancho, área y perímetro húmedo, etc ([28; 32; 55; 60; 85]). No obstante, el uso de estos coeficientes, más que permitir el cálculo exacto de dichos coeficientes, permiten obtener aproximaciones y valores generales [78], los cuales deben ser refinados con medi-

ciones experimentales en el cauce del río, por medio de trazadores ([2; 91]). [78] presenta un sistema experto, basado en un algoritmo neuro-difuso adaptativo, para la determinación de coeficientes de dispersión longitudinales en ríos. Tomando como soporte las expresiones empíricas presentadas por diversos autores, este algoritmo busca seleccionar la expresión que mejor se ajusta a las condiciones particulares de la corriente simulada.



Figura 2.6: Vertido de contaminantes en un río provenientes de cauce tributario. Foto tomada de www.aslo.org

Capítulo 3

El método de Petrov-Galerkin en contracorriente (*SUPG*): planteamiento unidimensional

El objetivo de esta sección es presentar las bases del método de estabilización de Petrov-Galerkin en contracorriente (*SUPG*). Con el fin de hacer más claro el fundamento de este método de estabilización, la formulación presentada se hará para el problema difusivo-advectivo en una dimensión espacial en estado estable. Posteriormente se incluirá la variable temporal para tratar problemas transitorios. Por último, se introducirá el término reactivo y se analizará como este término influye en el cálculo del parámetro de estabilización α .

3.1. Planteamiento unidimensional de la solución por elementos finitos de la ecuación estacionaria de Difusión-Advección

Retomando la ecuación de Difusión-Advección-Reacción en su forma unidimensional y estacionaria:

$$-\frac{d}{dx}\left(k\frac{d\phi}{dx}\right) + u\frac{d\phi}{dx} = F(x) \quad (3.1.1)$$

resulta claro que no se trata de una ecuación diferencial auto-adjunta, debido a la presencia del término advectivo. Esta condición hace que la solución numérica de la misma sea un problema de especial interés. Con el fin de analizar la relación de este término advectivo con la inestabilidad en la solución, se plantea a continuación la solución por elementos finitos de esta ecuación.

Así entonces, aplicando el método de los residuos ponderados a la ecuación 3.1.1, se obtiene la expresión 3.1.2:

$$\int_{\Omega} W_l \left(-\frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + u \frac{d\phi}{dx} - F(x) \right) dx = 0 \quad (3.1.2)$$

separando por términos, se llega a:

$$-\int_{\Omega} W_l \left(\frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) \right) dx + \int_{\Omega} W_l \left(u \frac{d\phi}{dx} \right) dx - \int_{\Omega} W_l F(x) dx = 0 \quad (3.1.3)$$

Aplicando integración por partes al primer término de la ecuación 3.1.3, se obtiene la forma débil de la formulación por residuos ponderados 3.1.4.

$$\int_{\Omega} \frac{dW_l}{dx} k \frac{d\phi}{dx} dx + \int_{\Omega} W_l \left(u \frac{d\phi}{dx} \right) dx - \int_{\Omega} W_l F(x) dx - \left[W_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} = 0 \quad (3.1.4)$$

Suponiendo aproximaciones discretas lineales del tipo:

$$\phi^e = \sum_{m=1}^2 N_m \phi_m \quad (3.1.5)$$

en donde ϕ^e es la aproximación lineal para un tramo o elemento e , N_m son las funciones de forma lineales definidas para un elemento unidimensional (mostradas en la Figura 3.1) y ϕ_m son los valores nodales de la función solución $\phi(x)$.

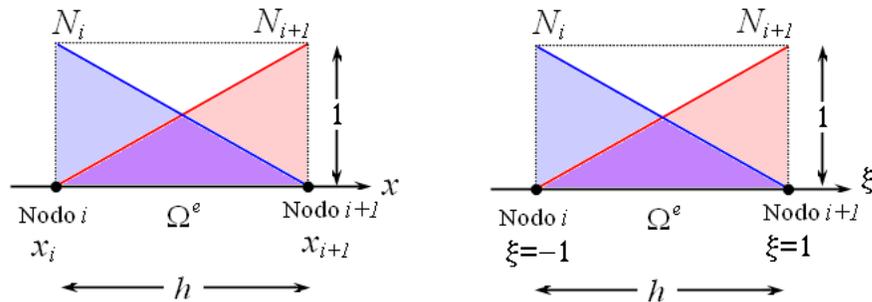


Figura 3.1: Funciones de forma lineales para un elemento unidimensional.

la ecuación debilitada de residuos ponderados queda ahora escrita como 3.1.6:

$$\sum_e \sum_{m=1}^2 \left(\int_{\Omega^e} \frac{dW_l}{dx} k \frac{dN_m}{dx} dx + \int_{\Omega^e} W_l u \frac{dN_m}{dx} dx \right) \phi_m = \int_{\Omega^e} W_l F(x) dx + \left[W_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \quad (3.1.6)$$

Empleando las funciones de forma expresadas en coordenadas locales (ξ) (ecuación 3.1.7), la ecuación 3.1.6 puede ser expresada ahora de la forma mostrada en 3.1.8.

$$\begin{aligned} N_i &= -\frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2} \\ N_{i+1} &= \frac{1}{2}\xi + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

$$\sum_e \sum_{m=1}^2 \left(\frac{2}{h} \int_{-1}^1 \frac{dW_l}{d\xi} k \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 W_l u \frac{dN_m}{d\xi} d\xi \right) \phi_m = \frac{h}{2} \int_{-1}^1 W_l F(\xi) d\xi + \left[W_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \quad (3.1.8)$$

Esta expresión representa un sistema de ecuaciones algebraicas lineales, en donde las incógnitas son los valores nodales ϕ_m . De este modo, y considerando las funciones de ponderación, W_l , iguales a las funciones de forma, N_m (denominado método *Galerkin* estándar o método *Bubnov-Galerkin*), el aporte de cada elemento al sistema de ecuaciones puede escribirse de la forma matricial mostrada en 3.1.9.

$$[K_{lm}]^e [\phi_m]^e = [f_l]^e \quad (3.1.9)$$

en donde:

$$\begin{aligned} [K_{lm}]^e &= \frac{2}{h} \int_{-1}^1 \frac{dN_l}{d\xi} k \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 N_l u \frac{dN_m}{d\xi} d\xi \\ [K_{lm}]^e &= \frac{2}{h} \begin{bmatrix} \int_{-1}^1 k \left(\frac{dN_i}{d\xi} \right)^2 d\xi & \int_{-1}^1 k \frac{dN_i}{d\xi} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \\ \int_{-1}^1 k \frac{dN_i}{d\xi} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 k \left(\frac{dN_{i+1}}{d\xi} \right)^2 d\xi \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \int_{-1}^1 u N_i \frac{dN_i}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 u N_i \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \\ \int_{-1}^1 u N_{i+1} \frac{dN_i}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 u N_{i+1} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

y:

$$[f_l]^e = \begin{bmatrix} \frac{h}{2} \int_{-1}^1 N_i F(\xi) d\xi + \left[N_i k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \\ \frac{h}{2} \int_{-1}^1 N_{i+1} F(\xi) d\xi + \left[N_{i+1} k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \end{bmatrix} \quad (3.1.11)$$

Evaluando la expresión 3.1.10, considerando un coeficiente de difusión (k) y una velocidad (u) constante al interior del elemento (e), se obtiene la ecuación 3.1.12:

$$[K_{lm}]^e = \frac{k}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{u}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{aa} & K_{ab} \\ K_{ba} & K_{bb} \end{bmatrix} \quad (3.1.12)$$

Como se observa, la matriz de rigidez (K_{lm}) del elemento esta formada por dos componentes, una simétrica y una asimétrica. La primera está definida por el fenómeno difusivo, mientras que la segunda se deriva del término advectivo. El carácter asimétrico proviene entonces de la naturaleza no autoadjunta del operador diferencial advectivo.

El ensamble del sistema de ecuaciones para un dominio lineal discretizado se puede escribir entonces como:

$$\begin{bmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & K_{ab} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & K_{bb} + K_{aa} & K_{ab} & 0 & \dots \\ \dots & K_{ba} & K_{bb} + K_{aa} & K_{ab} & \dots \\ \dots & 0 & K_{ba} & K_{bb} + K_{aa} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & K_{ba} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dots \\ \dots \\ \phi_{i-1} \\ \phi_i \\ \phi_{i+1} \\ \dots \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots \\ \dots \\ f_{i-1} \\ f_i \\ f_{i+1} \\ \dots \\ \dots \end{bmatrix} \quad (3.1.13)$$

Es decir, la ecuación general de ensamble del problema, se define como:

$$-\left(\frac{k}{h} + \frac{u}{2}\right)\phi_{i-1} + \frac{2k}{h}\phi_i + \left(-\frac{k}{h} + \frac{u}{2}\right)\phi_{i+1} = f_i \quad (3.1.14)$$

Definiendo el número adimensional de *Peclet* ($P_e = \frac{uh}{2k}$), la ecuación 3.1.14 puede escribirse de la siguiente forma:

$$-\left(1 + P_e\right)\phi_{i-1} + 2\phi_i + \left(P_e - 1\right)\phi_{i+1} = \frac{h}{k}f_i \quad (3.1.15)$$

Esta ecuación de ensamble muestra la analogía de la formulación de elementos finitos con un planteamiento por diferencias finitas. De hecho, puede mostrarse que se llega a la misma ecuación de ensamble si se emplean diferencias finitas centradas. En segundo lugar se debe analizar como la presencia del número de *Peclet* (P_e) genera una mayor ponderación de la información de los nodos aguas abajo, restando peso a la información asociada con los nodos ubicados aguas arriba. Esta condición, muestra que el planteamiento numérico no se adapta a la naturaleza del fenómeno, pues el mismo se caracteriza por una propagación de información en la dirección de la corriente, de modo que resulta más importante para el análisis del fenómeno la información proveniente de los nodos aguas arriba. Visto desde este punto de vista, se requiere incorporar en el método una corrección que permita aumentar el peso de la información relacionada con los nodos (ϕ_{i-1}). Esta corrección se logra modificando la función de peso (W_l).

3.2. Método de estabilización Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG)

Se pueden plantear diversos tipos de modificación de la función de peso, sin embargo cualquiera que sea debe aumentar el valor del término K_{ba} sobre el término K_{ab} , lo cual hace que la matriz de rigidez se aproxime a una forma simétrica, o lo que es lo mismo, que se valore con más peso la información de los nodos aguas arriba.

Un planteamiento correctivo del método de elementos finitos (también denominado técnica de estabilización) consiste en modificar las funciones de peso lineales, tal como se plantea en la Figura 3.2.

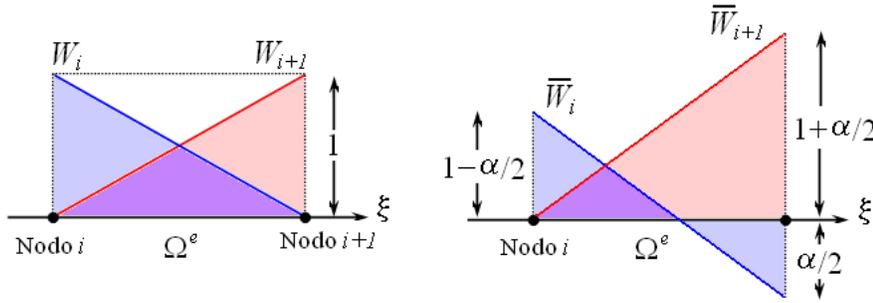


Figura 3.2: Función de peso original (izquierda) y perturbada por la adición de una cantidad constante $\frac{\alpha}{2}$ (derecha).

Nótese como la modificación propuesta en la Figura 3.2, hace que las funciones de peso se conviertan en funciones discontinuas, no obstante esta discontinuidad es requerida para cambiar la ponderación sobre cada uno de los nodos. La perturbación introducida sobre las funciones de peso originales tienen el efecto de aumentar el área bajo la función \bar{W}_2 , en tanto que se reduce el área bajo la línea \bar{W}_1 . Este cambio en los valores de las áreas puede entenderse, al revisar el segundo sumando de la expresión 3.1.10, como una sobreponderación del término K_{ba} y una reducción del peso del término K_{ab} . Desde el punto de vista matemático, las funciones de peso modificadas, mostradas anteriormente, se expresan de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\bar{W}_l &= W_l + \alpha \frac{dW_l}{d\xi} = W_l \pm \frac{\alpha}{2} \\ \bar{W}_i &= \frac{1}{2}(-\xi - \alpha + 1) \\ \bar{W}_{i+1} &= \frac{1}{2}(\xi + \alpha + 1)\end{aligned}\tag{3.2.16}$$

en donde α es un parámetro de perturbación que debe ser calibrado. Más adelante se deducirán las expresiones que permiten establecer el valor adecuado para este término. Este

método de estabilización es denominado el método de *Petrov-Galerkin en contracorriente*, o *SUPG* por sus siglas en inglés Streamline Upwind Petrov-Galerkin. Resulta claro que con $\alpha = 0$ el método *SUPG* se convierte en el método Bubnov-Galerkin y las funciones de peso no resultan modificadas.

Al incorporar la definición de las funciones de peso 3.2.16, en la expresión de residuos ponderados para la ecuación diferencial de Difusión-Advección-Reacción 3.1.4, se obtiene la siguiente expresión:

$$\int_{\Omega} \frac{d\bar{W}_l}{dx} k \frac{d\phi}{dx} dx + \int_{\Omega} \bar{W}_l \left(u \frac{d\phi}{dx} \right) dx - \int_{\Omega} \bar{W}_l F(x) dx - \left[\bar{W}_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} = 0 \quad (3.2.17)$$

Empleando aproximaciones a tramos para la función escalar ϕ (como en 3.1.5), se llega a:

$$\sum_e \sum_{m=1}^2 \left(\frac{2}{h} \int_{-1}^1 \frac{d\bar{W}_l}{d\xi} k \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 \bar{W}_l u \frac{dN_m}{d\xi} d\xi \right) \phi_m = \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \bar{W}_l F(\xi) d\xi + \left[\bar{W}_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \quad (3.2.18)$$

De modo que, ahora el aporte de un elemento a la matriz de rigidez del sistema estará dado por:

$$[K_{lm}]^e = \frac{2}{h} \int_{-1}^1 \left(\frac{dN_l}{d\xi} + \alpha \frac{d^2 N_l}{d\xi^2} \right) k \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 \left(N_l + \alpha \frac{dN_l}{d\xi} \right) u \frac{dN_m}{d\xi} d\xi \quad (3.2.19)$$

Desarrollando la anterior ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned} [K_{lm}]^e = \frac{2}{h} & \begin{bmatrix} \int_{-1}^1 k \left(\frac{dN_i}{d\xi} \right)^2 d\xi & \int_{-1}^1 k \frac{dN_i}{d\xi} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \\ \int_{-1}^1 k \frac{dN_i}{d\xi} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 k \left(\frac{dN_{i+1}}{d\xi} \right)^2 d\xi \end{bmatrix} + \frac{2}{h} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \int_{-1}^1 u N_i \frac{dN_i}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 u N_i \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \\ \int_{-1}^1 u N_{i+1} \frac{dN_i}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 u N_{i+1} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \int_{-1}^1 \alpha u \left(\frac{dN_i}{d\xi} \right)^2 d\xi & \int_{-1}^1 \alpha u \frac{dN_i}{d\xi} \frac{dN_{i+1}}{d\xi} d\xi \\ \int_{-1}^1 \alpha u \frac{dN_{i+1}}{d\xi} \frac{dN_i}{d\xi} d\xi & \int_{-1}^1 \alpha u \left(\frac{dN_{i+1}}{d\xi} \right)^2 d\xi \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Al evaluar las integrales de la expresión 3.2.20, la matriz de rigidez elemental queda expresada como:

$$[K_{lm}]^e = \frac{k}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{u}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{u\alpha}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.2.21)$$

Al comparar esta última expresión con la ecuación 3.1.12, obtenida previamente, se encuentra que la perturbación adicionada a la función de peso introdujo un matriz de estabilización simétrica, la cual eventualmente permite corregir los problemas de falsas oscilaciones mencionados anteriormente. Se observa que el éxito de la estabilización radica únicamente en la correcta selección del parámetro α .

$$[K_{lm}]^e = [K]^e + [K_s]^e \quad (3.2.22)$$

donde $[K_s]^e$ es la componente de estabilización adicionada. De forma análoga, el término derecho de la expresión 3.2.18, se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \bar{W}_l F(\xi) d\xi + \left[\bar{W}_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 N_l F(\xi) d\xi + \left[N_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \\ &+ \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \alpha \frac{dN_l}{d\xi} F(\xi) d\xi + \left[\alpha \frac{dN_l}{d\xi} k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \\ &= [f] + [f_s] \end{aligned} \quad (3.2.23)$$

donde $[f_s]$ es el término estabilizador adicionado al vector $[f]$.

De acuerdo con lo anterior, la ecuación de ensamble 3.1.14, se modifica de la siguiente manera:

$$\left[-\frac{k}{h} - \frac{u}{2}(1 + \alpha) \right] \phi_{i-1} + \left[2\frac{k}{h} + u\alpha \right] \phi_i + \left[-\frac{k}{h} + \frac{u}{2}(1 - \alpha) \right] \phi_{i+1} = f_i \quad (3.2.24)$$

Simplificando la anterior expresión, empleando el número adimensional de Peclet, se llega a:

$$- \left[1 + P_e(1 + \alpha) \right] \phi_{i-1} + 2 \left[1 + \alpha P_e \right] \phi_i + \left[-1 + P_e(1 - \alpha) \right] \phi_{i+1} = \frac{h}{k} f_i \quad (3.2.25)$$

en donde f_i es resulta de evaluar la expresión 3.2.23 en el i -ésimo nodo. Así pues, como en el nodo i coinciden los elementos $e - 1$ y e (ver Figura 3.3), el valor total del término f_i resulta de la adición de los aportes de estos dos elementos, tal como lo muestra la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} f_i &= \frac{h}{2} \int_{\Omega^{e-1}} \left(N_i + \alpha \frac{dN_i}{d\xi} \right) F(\xi) d\xi + \frac{h}{2} \int_{\Omega^e} \left(N_i + \alpha \frac{dN_i}{d\xi} \right) F(\xi) d\xi \\ f_i &= \frac{h}{2} \int_{\Omega^{e-1}} \left(N_i + \frac{\alpha}{2} \right) F(\xi) d\xi + \frac{h}{2} \int_{\Omega^e} \left(N_i - \frac{\alpha}{2} \right) F(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

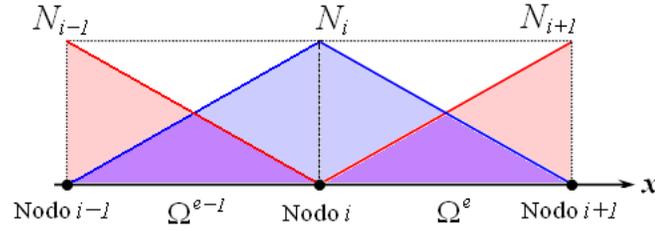


Figura 3.3: Funciones de forma lineales.

Considerando una función de generación de valor constante sobre todo el dominio del problema (Q), la ecuación 3.2.26 se reduce a:

$$f_i = Qh \quad (3.2.27)$$

3.3. Correspondencia del método *SUPG* con el método de las diferencias finitas

Resulta comprensible por que el método de las diferencias finitas fue la primera salida al problema de inestabilidad numérica en la solución de la ecuación diferencial 3.1.1 ([23; 89]). La sencilla implementación de este método permitió fácilmente pasar de un planteamiento en diferencias finitas centradas para la segunda y primera derivada (ecuaciones 3.3.28 y 3.3.29 respectivamente), lo cual lleva a una ecuación de ensamble idéntica a la obtenida por el método Bubnov-Galerkin 3.1.15,

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} \approx \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2} \quad (3.3.28)$$

$$\frac{d\phi}{dx} \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} \quad (3.3.29)$$

a un planteamiento que reemplaza la aproximación de la primera derivada por una diferencia finita hacia atrás 3.3.30:

$$\frac{d\phi}{dx} \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} \quad (3.3.30)$$

con lo cual la ecuación de ensamble para el problema de Difusión-Advección resulta ser:

$$-(2P_e + 1)\phi_{i-1} + 2(1 + P_e)\phi_i - \phi_{i+1} = \frac{Qh^2}{k} \quad (3.3.31)$$

Esta ecuación de ensamble es idéntica a la lograda por medio de la expresión 3.2.25 haciendo $\alpha = 1$, el cual es el mayor valor de coeficiente de perturbación que puede ser empleado, tal como se mostrará más adelante. Este excesivo valor de α hace que la solución

por diferencias finitas descentradas o diferencias finitas *upwind*, proporcionen soluciones estables aunque poco exactas, incorporando mayor cantidad de difusión numérica que el método *SUPG*. De aquí que las soluciones alcanzadas con diferencias finitas *upwind* siempre se muestren sobre-difundidas con respecto a la solución exacta. Resulta claro una vez más que la exactitud y eficacia del método *SUPG* depende del dimensionamiento adecuado del valor del coeficiente de perturbación.

3.4. Planteamiento autoadjunto de la ecuación de residuos ponderados

Como ya se mencionó previamente, una adecuada estabilización a través del método *SUPG* supone una correcta selección del parámetro de estabilización α . Una procedimiento para deducir una expresión de cálculo de este parámetro de estabilización consiste en reformular la ecuación de residuos ponderados, de modo que ahora todos los operadores involucrados sean operadores autoadjuntos. A continuación se presenta este procedimiento, introducido inicialmente por [44].

Planteando la ecuación de Difusión-Advección,

$$-\frac{d}{dx}\left(k\frac{d\phi}{dx}\right) + u\frac{d\phi}{dx} - F(x) = 0 \quad (3.4.32)$$

La ecuación de residuos ponderados para esta ecuación diferencial, esta dada por:

$$\int_{\Omega} W_l \left(-\frac{d}{dx}\left(k\frac{d\phi}{dx}\right) + u\frac{d\phi}{dx} - F(x) \right) dx = 0 \quad (3.4.33)$$

Como ya se observó, la presencia del término advectivo involucra un operador no autoadjunto. Este operador puede ser modificado empleando una función de peso analítica adecuada p , tal como se muestra a continuación:

$$\int_{\Omega} W_l p \left(-\frac{d}{dx}\left(k\frac{d\phi}{dx}\right) + u\frac{d\phi}{dx} - F(x) \right) dx = 0 \quad (3.4.34)$$

Debilitando la expresión anterior se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{d(W_l p)}{dx} k \frac{d\phi}{dx} dx + \int_{\Omega} W_l p u \frac{d\phi}{dx} dx - \int_{\Omega} W_l p F(x) dx - \left[W_l p k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} &= 0 \\ \int_{\Omega} p \frac{dW_l}{dx} k \frac{d\phi}{dx} dx + \int_{\Omega} W_l \frac{dp}{dx} k \frac{d\phi}{dx} dx + \int_{\Omega} W_l p u \frac{d\phi}{dx} dx - \int_{\Omega} W_l p F(x) dx - \left[W_l p k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} &= 0 \end{aligned} \quad (3.4.35)$$

La selección de una adecuada función p , permitirá cancelar el tercer término (operador no-autoadjunto), con el segundo término de la ecuación 3.4.35, es decir:

$$\int_{\Omega} W_l \left(k \frac{dp}{dx} + pu \right) \frac{d\phi}{dx} dx = 0 \quad (3.4.36)$$

de donde resulta la condición 3.4.37, que permite conocer la forma requerida de la función p (ecuación 3.4.38).

$$k \frac{dp}{dx} + pu = 0 \quad (3.4.37)$$

$$p = C e^{-\frac{2P_e x}{h}} \quad (3.4.38)$$

donde C es una constante de integración que resulta de resolver la ecuación diferencial ordinaria 3.4.37.

De este modo al reemplazar el resultado 3.4.38 en la expresión 3.4.35, se obtiene la ecuación 3.4.39:

$$\int_{\Omega} e^{-\frac{2P_e x}{h}} \frac{dW_l}{dx} k \frac{d\phi}{dx} dx - \int_{\Omega} e^{-\frac{2P_e x}{h}} W_l F(x) dx - \left[W_l e^{-\frac{2P_e x}{h}} k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} = 0 \quad (3.4.39)$$

Suponiendo aproximaciones lineales discretas 3.1.5 y empleando el método Bubnov-Galerkin, se llega a la ecuación 3.4.40:

$$\sum_e \sum_{m=1}^2 \left(\int_{\Omega^e} e^{-\frac{2P_e x}{h}} \frac{dN_l}{dx} k \frac{dN_m}{dx} dx \right) = \int_{\Omega^e} e^{-\frac{2P_e x}{h}} N_l F(x) dx + \left[N_l e^{-\frac{2P_e x}{h}} k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \quad (3.4.40)$$

Así que la ecuación general de ensamble puede escribirse como:

$$K_{ba}\phi_{i-1} + (K_{aa} + K_{bb})\phi_i + K_{ab}\phi_{i+1} = f_i \quad (3.4.41)$$

donde:

$$\begin{aligned} K_{ba} &= -\frac{k}{h} \left[\frac{e^{-\frac{2P_e x_i}{h}} (e^{2P_e} - 1)}{2P_e} \right] \\ K_{bb} &= \frac{k}{h} \left[\frac{e^{-\frac{2P_e x_i}{h}} (e^{2P_e} - 1)}{2P_e} \right] \\ K_{aa} &= \frac{k}{h} e^{-\frac{2P_e x_i}{h}} \left[\frac{e^{-2P_e} (e^{2P_e} - 1)}{2P_e} \right] \\ K_{ab} &= -\frac{k}{h} e^{-\frac{2P_e x_i}{h}} \left[\frac{e^{-2P_e} (e^{2P_e} - 1)}{2P_e} \right] \end{aligned} \quad (3.4.42)$$

y

$$f_i = \int_{\Omega^{e-1}} e^{-\frac{2P_e x}{h}} N_i F(x) dx + \int_{\Omega^e} e^{-\frac{2P_e x}{h}} N_i F(x) dx \quad (3.4.43)$$

Considerando una función de generación de valor constante sobre todo el dominio del problema (Q), la ecuación 3.4.43 se reduce a:

$$f_i = Qh \frac{e^{-\frac{2P_e x_{i+1}}{h}} (e^{2P_e} - 1)^2}{4P_e^2} \quad (3.4.44)$$

Simplificando la expresión 3.4.41, se llega a la ecuación de ensamble:

$$-2P_e \frac{(e^{2P_e} - 1)}{(e^{P_e} - e^{-P_e})^2} \phi_{i-1} + 2P_e \frac{(e^{2P_e} - e^{-2P_e})}{(e^{P_e} - e^{-P_e})^2} \phi_i - 2P_e \frac{(1 - e^{-2P_e})}{(e^{P_e} - e^{-P_e})^2} \phi_{i+1} = \frac{Qh^2}{k} \quad (3.4.45)$$

Así entonces, si esta última expresión representa la solución numérica estable a la ecuación de Difusión-Advección, entonces resulta útil comparar esta ecuación de ensamble con la aproximación estabilizada con *SUPG*, planteada en 3.2.25. De esta forma, al igualar los coeficientes que acompañan al término ϕ_{i-1} (o al término ϕ_{i+1}) se puede encontrar que el valor de α que pondera adecuadamente la información de estos nodos es:

$$-2P_e \frac{(1 - e^{-2P_e})}{(e^{P_e} - e^{-P_e})^2} = P_e(1 - \alpha) - 1 \quad (3.4.46)$$

de modo que:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{e^{P_e} + e^{-P_e}}{e^{P_e} - e^{-P_e}} - \frac{1}{P_e} \\ \alpha_{opt} &= \coth P_e - \frac{1}{P_e} \end{aligned} \quad (3.4.47)$$

Es necesario aclarar que en todo caso no resulta correcto la eliminación total de la influencia del nodo ϕ_{i+1} en la ecuación 3.2.25, por lo que el mínimo valor, o valor crítico de α , esta determinado por:

$$\begin{aligned} P_e(1 - \alpha) - 1 &> 0 \\ \alpha_{crit} &= 1 - \frac{1}{P_e} \end{aligned} \quad (3.4.48)$$

En la Figura 3.4 se muestra el comportamiento del α_{opt} y el α_{crit} para diferentes valores en el números de Peclet. Del análisis de esta figura, así como de la ecuación 3.4.48, se entiende como resulta necesario estabilizar una solución, es decir emplear un $\alpha > 0$, solo si $P_e > 1$. La Figura 3.5 muestra el tipo de método numérico y el tipo de estabilización

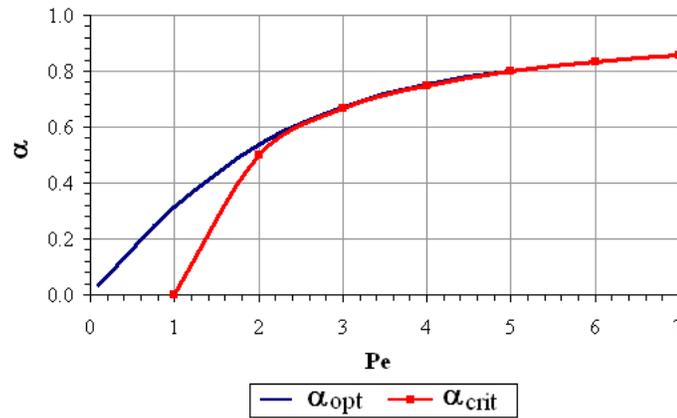


Figura 3.4: Comportamiento del α_{opt} y el α_{crit} para diferentes números de Peclet.

obtenida en relación con los valores de α empleados. Como se observa en esta figura, el uso de valores superiores a α_{opt} genera una cantidad de difusión artificial superior a la óptima, por lo que las aproximaciones alcanzadas serán sobre-estabilizadas, es decir, estables pero poco exactas. El caso extremo de esta estabilización excesiva, es el método de las diferencias finitas *upwind*, el cual es equivalente al método *SUPG* con $\alpha = 1$. Por otro lado el uso de $\alpha < \alpha_{crit}$, genera soluciones sub-estabilizadas o inestables. Esta inestabilidad se puede entender como la presencia de una difusión numérica negativa que pondera negativamente la información del nodo ϕ_{i+1} . El caso extremo de esta escasa estabilización es el método Bubnov-Galerkin, el cual equivale al método *SUPG* con $\alpha = 0$.

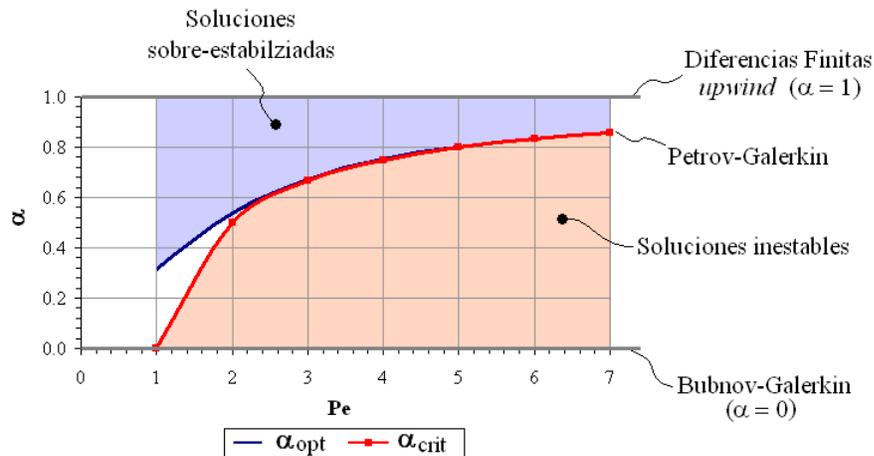


Figura 3.5: Efecto del coeficiente α en la definición del tipo del método numérico empleado.

3.5. Difusión artificial en el método SUPG

Un análisis cuidadoso de la expresión para el cálculo de la matriz de rigidez del sistema 3.2.21, alcanzada a través de la modificación de la función de ponderación (SUPG), permite observar como la estabilización de la solución se alcanza adicionando un término difusivo adicional al problema, el cual por supuesto tiene como consecuencia la reducción del número de Peclet.

$$\begin{aligned} [K_{lm}]^e &= \left(\frac{k}{h} + \frac{u\alpha}{2} \right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{u}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \\ [K_{lm}]^e &= \left(\frac{k + k_{art}}{h} \right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{u}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.5.49)$$

El papel de esta difusión artificial o difusión *equilibradora*, es anular el efecto de la difusión negativa introducida a la solución numérica cuando se emplea el método Bubnov-Galerkin o el método de las diferencias finitas centradas [112]. Este enfoque resulta especialmente importante al momento de plantear el método SUPG en dos y tres dimensiones, tal como se mostrara más adelante.

3.6. Planteamiento unidimensional de la solución por elementos finitos de la ecuación transitoria de Difusión-Advección

En las secciones anteriores se planteo la solución por elementos finitos de la ecuación diferencial de Difusión-Advección en estado estacionario, así como la técnica de estabilización de esta aproximación numérica. Se incorporará ahora la dimensión temporal para la solución de esta ecuación en régimen transitorio 3.6.50.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = F(x, t) \quad (3.6.50)$$

Aunque algunos autores plantean la solución numérica de la ecuación 3.6.50 discretizando la variable temporal con elementos finitos [51], el planteamiento mostrado a continuación es usado de forma extensiva. Dicho método consiste en discretizar el tiempo empleando un esquema de diferencias finitas. En general, esta última técnica puede generalizarse a partir de la expresión 3.6.51 [24].

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \theta \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^{n+1} + (1 - \theta) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^n \quad (3.6.51)$$

donde el superíndice n se refiere al paso de tiempo, Δt al incremento temporal y θ es un parámetro que define el esquema de diferencia finita a emplear. Así por ejemplo, para $\theta = 0$, la ecuación 3.6.51 se reduce a:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^n \quad (3.6.52)$$

Este esquema se denomina *Forward-Euler* y define un método totalmente explícito en la dimensión temporal. Por otro lado, tomando un valor $\theta = 1$ se llega a la expresión:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^{n+1} \quad (3.6.53)$$

que corresponde a un esquema totalmente implícito denominado *Backward-Euler*. Por último, tomando $\theta = \frac{1}{2}$, se llega a la ecuación:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^{n+1} + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^n \quad (3.6.54)$$

que define un esquema semi-implícito denominado comúnmente método *Crank-Nicolson*.

Aplicando el método de residuos ponderados y estabilizando el esquema a través del método de Petrov-Galerkin en contracorriente (SUPG), se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \bar{W}_l (\phi^{n+1} - \phi^n) dx &= \theta \int_{\Omega} \bar{W}_l \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^{n+1} dx \\ &+ (1 - \theta) \int_{\Omega} \bar{W}_l \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} + F(x, t) \right]^n dx \end{aligned} \quad (3.6.55)$$

Aplicando una aproximación lineal por tramos para cada una de las variables (ϕ^n y ϕ^{n+1}) 3.6.56 y simplificando se llega a la expresión 3.6.57.

$$\begin{aligned} \phi^n &= \sum_{m=1}^2 N_m \phi_m^n \\ \phi^{n+1} &= \sum_{m=1}^2 N_m \phi_m^{n+1} \end{aligned} \quad (3.6.56)$$

$$\begin{aligned}
 \sum_e \sum_m \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega^e} \bar{W}_l N_m dx (\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) = & \\
 & \sum_m \theta \left(\int_{\Omega^e} \frac{d\bar{W}_l}{dx} k \frac{dN_m}{dx} dx - \int_{\Omega^e} \bar{W}_l u \frac{dN_m}{dx} dx \right) \phi_m^{n+1} \\
 & + \sum_m (1 - \theta) \left(\int_{\Omega^e} \frac{d\bar{W}_l}{dx} k \frac{dN_m}{dx} dx - \int_{\Omega^e} \bar{W}_l u \frac{dN_m}{dx} dx \right) \phi_m^n \\
 & + \theta \left(\int_{\Omega^e} \bar{W}_l F^{n+1}(x, t) dx + \left[\bar{W}_l k \frac{d\phi_m^{n+1}}{dx} \right]_{\Gamma} \right) \\
 & + (1 - \theta) \left(\int_{\Omega^e} \bar{W}_l F^n(x, t) dx + \left[\bar{W}_l k \frac{d\phi_m^n}{dx} \right]_{\Gamma} \right) \quad (3.6.57)
 \end{aligned}$$

Empleando, la notación de las ecuaciones 3.2.22 y 3.2.23, la anterior ecuación puede escribirse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\Delta t} [M] (\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) = & \theta ([K] + [K_s]) \phi^{n+1} + (1 - \theta) ([K] + [K_s]) \phi^n \\
 & + \theta ([f] + [f_s]) + (1 - \theta) ([f] + [f_s]) \quad (3.6.58)
 \end{aligned}$$

donde $[M]$ se denomina matriz de masa y se define como:

$$[M] = \int_{\Omega^e} \bar{W}_l N_m dx = \int_{\Omega^e} W_l N_m dx + \int_{\Omega^e} \frac{\alpha h}{2} \frac{dW_l}{dx} N_m dx \quad (3.6.59)$$

$$[M] = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} \int_{-1}^1 \left(N_i N_i + \alpha \frac{dN_i}{d\xi} N_i \right) d\xi & \int_{-1}^1 \left(N_i N_{i+1} + \alpha \frac{dN_i}{d\xi} N_{i+1} \right) d\xi \\ \int_{-1}^1 \left(N_{i+1} N_i + \alpha \frac{dN_{i+1}}{d\xi} N_i \right) d\xi & \int_{-1}^1 \left(N_{i+1} N_{i+1} + \alpha \frac{dN_{i+1}}{d\xi} N_{i+1} \right) d\xi \end{bmatrix} \quad (3.6.60)$$

$$[M] = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} \frac{2}{3} - \frac{\alpha}{2} & \frac{1}{3} - \frac{\alpha}{2} \\ \frac{1}{3} + \frac{\alpha}{2} & \frac{2}{3} + \frac{\alpha}{2} \end{bmatrix} \quad (3.6.61)$$

La solución de la ecuación 3.6.58, consiste en determinar el valor del vector ϕ_m^{n+1} a partir del vector conocido ϕ_m^n . Este cálculo se realiza normalmente empleando algún algoritmo de búsqueda de raíces, como el método de Newton-Raphson.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\Delta t} [M] (\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) - & \theta ([K] + [K_s]) \phi^{n+1} + (1 - \theta) ([K] + [K_s]) \phi^n \\
 - \theta ([f] + [f_s]) + & (1 - \theta) ([f] + [f_s]) = RHS \quad (3.6.62)
 \end{aligned}$$

donde el término RHS es el residuo de la ecuación cuando se aproxima el valor buscado ϕ^{n+1} .

Derivando este residuo con respecto a la variable buscada se obtiene la matriz de rigidez tangente $[A]$, así:

$$\frac{\partial(RHS)}{\partial\phi_m^{n+1}} = [A] = \frac{[M]}{\Delta t} - \theta([K] + [K_s]) \quad (3.6.63)$$

La Figura 3.6 muestra gráficamente el proceso iterativo para la búsqueda del cero de la ecuación 3.6.62. De acuerdo con esta figura, se puede plantear las siguientes relaciones:

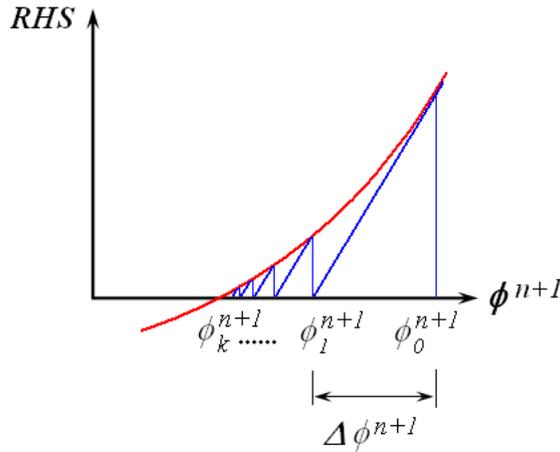


Figura 3.6: Esquema de iteración seguido por el método Newton-Raphson.

$$[A]\Delta\phi^{n+1} = RHS \quad (3.6.64)$$

$$\phi_1^{n+1} = \phi_0^{n+1} - \Delta\phi^{n+1} \quad (3.6.65)$$

Con estos elementos, el algoritmo de búsqueda de la solución es el siguiente:

1. Cálculo de la matriz tangente $[A]$ empleando el valor semilla ϕ_0^{n+1} empleando la expresión 3.6.63
2. Cálculo del valor RHS para el valor semilla ϕ_0^{n+1} empleando la expresión 3.6.62
3. Cálculo del término $\Delta\phi^{n+1}$ empleando la expresión 3.6.64
4. Cálculo de valor ϕ^{n+1} de la próxima iteración (ϕ_1^{n+1}) empleando la expresión 3.6.65
5. Inicio de una nueva iteración desde el paso 2 al 4.

6. Finalización del proceso de búsqueda de acuerdo con el cumplimiento de unos criterios de convergencia

3.7. Efecto del término reactivo en el método SUPG

Se analizará ahora el efecto que tiene el término reactivo en todo el planteamiento de estabilización enunciado hasta el momento. Así entonces, considerando el término reactivo en a la ecuación diferencial de Difusión-Reacción, se tiene:

$$-\frac{d}{dx}\left(k\frac{d\phi}{dx}\right) + u\frac{d\phi}{dx} - s\phi = F(x) \quad (3.7.66)$$

Aplicando residuos ponderados a esta ecuación se tiene:

$$\int_{\Omega} \bar{W}_l \left(-\frac{d}{dx}\left(k\frac{d\phi}{dx}\right) + u\frac{d\phi}{dx} - s\phi - F(x) \right) dx = 0 \quad (3.7.67)$$

Debilitando esta expresión y empleando una aproximación lineal discreta del tipo:

$$\phi^e = \sum_{m=1}^2 N_m \phi_m \quad (3.7.68)$$

se obtiene:

$$\sum_e \sum_m \left(\int_{\Omega^e} \frac{d\bar{W}_l}{dx} k \frac{dN_m}{dx} dx + \int_{\Omega^e} \bar{W}_l u \frac{dN_m}{dx} dx - \int_{\Omega^e} \bar{W}_l s N_m dx \right) \phi_m = \int_{\Omega^e} \bar{W}_l F(x) dx + \left[\bar{W}_l k \frac{d\phi}{dx} \right]_{\Gamma} \quad (3.7.69)$$

Empleando la definición de función de peso modificada presentada en 3.2.16, y expresando en coordenadas nodales, se llega a:

$$\begin{aligned} \sum_e \sum_m \left(\frac{2}{h} \int_{-1}^1 \frac{dN_l}{d\xi} k \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 N_l u \frac{dN_m}{d\xi} d\xi - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 N_l s N_m d\xi \right. \\ \left. \frac{2}{h} \int_{-1}^1 \alpha \frac{d^2 N_l}{d\xi^2} k \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 \alpha \frac{dN_l}{d\xi} u \frac{dN_m}{d\xi} d\xi - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \alpha \frac{dN_l}{d\xi} s N_m d\xi \right) \phi_m = \\ \frac{h}{2} \int_{-1}^1 N_l F(\xi) d\xi + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \alpha \frac{dN_l}{d\xi} F(\xi) d\xi + \left[N_l k \frac{d\phi}{d\xi} \right]_{\Gamma} + \left[\frac{dN_l}{d\xi} k \frac{d\phi}{d\xi} \right]_{\Gamma} \quad (3.7.70) \end{aligned}$$

operando algebraicamente la anterior expresión se llega a la ecuación 3.7.71,

$$\begin{aligned}
\sum_e \sum_m \left(2 \int_{-1}^1 \frac{dN_l}{d\xi} \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 2P_e N_l \frac{dN_m}{d\xi} d\xi - \int_{-1}^1 \sigma P_e N_l N_m d\xi \right. \\
\left. 2 \int_{-1}^1 \alpha \frac{d^2 N_l}{d\xi^2} \frac{dN_m}{d\xi} d\xi + \int_{-1}^1 2P_e \alpha \frac{dN_l}{d\xi} \frac{dN_m}{d\xi} d\xi - \int_{-1}^1 \alpha \sigma P_e \frac{dN_l}{d\xi} N_m d\xi \right) \phi_m = \\
\frac{h^2}{2k} \int_{-1}^1 N_l F(\xi) d\xi + \frac{\alpha h^2}{2k} \int_{-1}^1 \alpha \frac{dN_l}{d\xi} F(\xi) d\xi + \left[h N_l \frac{d\phi}{d\xi} \right]_{\Gamma} + \left[h \frac{dN_l}{d\xi} \frac{d\phi}{d\xi} \right]_{\Gamma} \quad (3.7.71)
\end{aligned}$$

en la cual σ es el número adimensional de *Damkohler*, el cual esta definido como:

$$\sigma = \frac{sh}{u} \quad (3.7.72)$$

Se observa entonces que el aporte de un elemento a la matriz de rigidez global esta dado por:

$$\begin{aligned}
[K] = [K] + [K_s] \begin{bmatrix} 1 - P_e - \frac{2}{3}\sigma P_e & -1 + P_e - \frac{1}{3}\sigma P_e \\ -1 - P_e - \frac{1}{3}\sigma P_e & 1 + P_e - \frac{2}{3}\sigma P_e \end{bmatrix} \\
+ \alpha \begin{bmatrix} P_e + \frac{\sigma P_e}{2} & -P_e + \frac{\sigma P_e}{2} \\ -P_e - \frac{\sigma P_e}{2} & P_e - \frac{\sigma P_e}{2} \end{bmatrix} \quad (3.7.73)
\end{aligned}$$

La ecuación de ensamble para este caso esta dada por:

$$\begin{aligned}
- \left[1 + P_e \left(1 + \alpha \right) + \sigma P_e \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{3} \right) \right] \phi_{i-1} + 2 \left[1 + \alpha P_e - \frac{2}{3} \sigma P_e \right] \phi_i \\
+ \left[-1 + P_e \left(1 - \alpha \right) + \sigma P_e \left(\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{3} \right) \right] \phi_{i+1} = f_i \quad (3.7.74)
\end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned}
f_i = \frac{h^2}{2k} \int_{\Omega_{e-1}} N_i F(\xi) d\xi + \frac{\alpha h^2}{2k} \int_{\Omega_{e-1}} \alpha \frac{dN_i}{d\xi} F(\xi) d\xi \\
+ \frac{h^2}{2k} \int_{\Omega_e} N_i F(\xi) d\xi + \frac{\alpha h^2}{2k} \int_{\Omega_e} \alpha \frac{dN_i}{d\xi} F(\xi) d\xi \quad (3.7.75)
\end{aligned}$$

Siguiendo el mismo análisis empleado para el problema difusivo-advectivo, se encuentra que la condición para no dar un peso negativo a la información del nodo ϕ_{i+1} , esta definida por:

$$-1 + P_e(1 - \alpha) + \sigma P_e\left(\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{3}\right) > 0 \quad (3.7.76)$$

por lo que el valor máximo admisible para el parámetro de perturbación α es igual a:

$$\alpha_{crit} = \frac{P_e\left(1 - \frac{\sigma}{3}\right) - 1}{P_e\left(1 - \frac{\sigma}{2}\right)} \quad (3.7.77)$$

De esta última expresión se puede concluir que es necesario estabilizar un problema cuando $\alpha_{crit} > 0$, es decir:

$$P_e\left(1 - \frac{\sigma}{3}\right) > 1 \quad (3.7.78)$$

Esta condición es coincidente con la planteada en la ecuación 2.2.9 [90]. La Figura 3.7 muestra el comportamiento del α_{crit} para diferentes valores de los números de P_e y Damkholer σ .

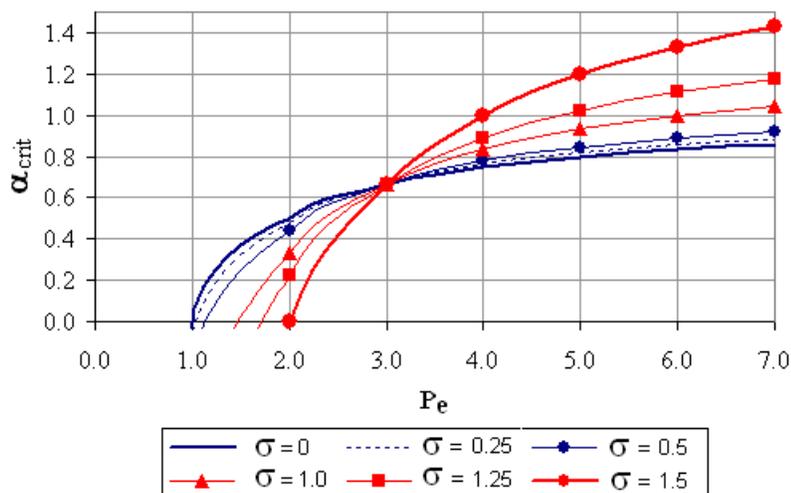


Figura 3.7: Influencia del término reactivo en el valor de α_{crit} .

3.8. Ejemplos de aplicación del método *SUPG* en problemas unidimensionales

3.8.1. Caso de estudio 1: Problema de Difusión-Advección con coeficientes constantes

En este caso se plantea un problema de Difusión-Advección con coeficientes constantes y una función de generación cúbica. El problema se describe matemáticamente en la ecuación

3.8.79, bajo las condiciones de borde mostradas en 3.8.80:

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + 400\frac{d\phi}{dx} = x^3 \quad (3.8.79)$$

$$\phi(0) = \phi(1) = 0 \quad (3.8.80)$$

En la Figura 3.8 se muestra el resultado de la implementación del método de estabilización de Petrov-Galerkin, comparándolo con el comportamiento de la solución encontrada mediante el método convencional (Bubnov-Galerkin), así como con la solución analítica exacta. Se observa como la solución Petrov-Galerkin implementada con 10 elementos ($P_e = 20$, $\alpha_{opt} = \alpha_{crit} = 0,95$, en todo el dominio) y un coeficiente de perturbación $\alpha = \alpha_{opt}$, es una solución nodalmente exacta y libre de oscilaciones, en tanto que la solución convencional presenta fuertes oscilaciones alrededor de la solución exacta (debido a que $P_e > 1$). Sin embargo, al aumentar el número de elementos a 20 ($P_e = 10$, $\alpha_{opt} = \alpha_{crit} = 0,9$) y 100 ($P_e = 2$, $\alpha_{opt} = 0,54$, $\alpha_{crit} = 0,5$), se observa en la solución no estabilizada una reducción en la amplitud de las oscilaciones y una convergencia hacia la solución exacta debido a la reducción en el número de Peclet.

Se puede ver como para la malla de 100 elementos la aproximación por Galerkin logra una respuesta adecuada, excepto en las zonas aguas abajo con cambios muy fuertes en el comportamiento de ϕ (cerca de $x = 1$), en donde la respuesta numérica aun exhibe una tendencia oscilatoria localizada. La Figura 3.9 muestra el comportamiento del error absoluto acumulado porcentual a lo largo del dominio para cada una de las tres mallas empleadas con el método *SUPG*, casos en los que se empleó un valor óptimo en el coeficiente de perturbación.

3.8.2. Caso de estudio 2: Problema de Difusión-Advección-Reacción con coeficientes constantes

En este problema, planteado en la ecuación diferencial 3.8.81, bajo las condiciones de borde 3.8.82, se analiza la estabilidad del método *Petrov-Galerkin* incluyendo términos reactivos en la ecuación diferencial y considerando coeficientes constantes en todo el dominio analizado.

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + 300\frac{d\phi}{dx} - 50\phi = 10e^{x^2} \quad (3.8.81)$$

$$\phi(1) = 1, \phi(3) = -1 \quad (3.8.82)$$

Como se puede apreciar en la Figura 3.10, para una malla formada por 40 elementos el comportamiento de la solución *Bubnov-Galerkin* es inestable dado que el problema esta

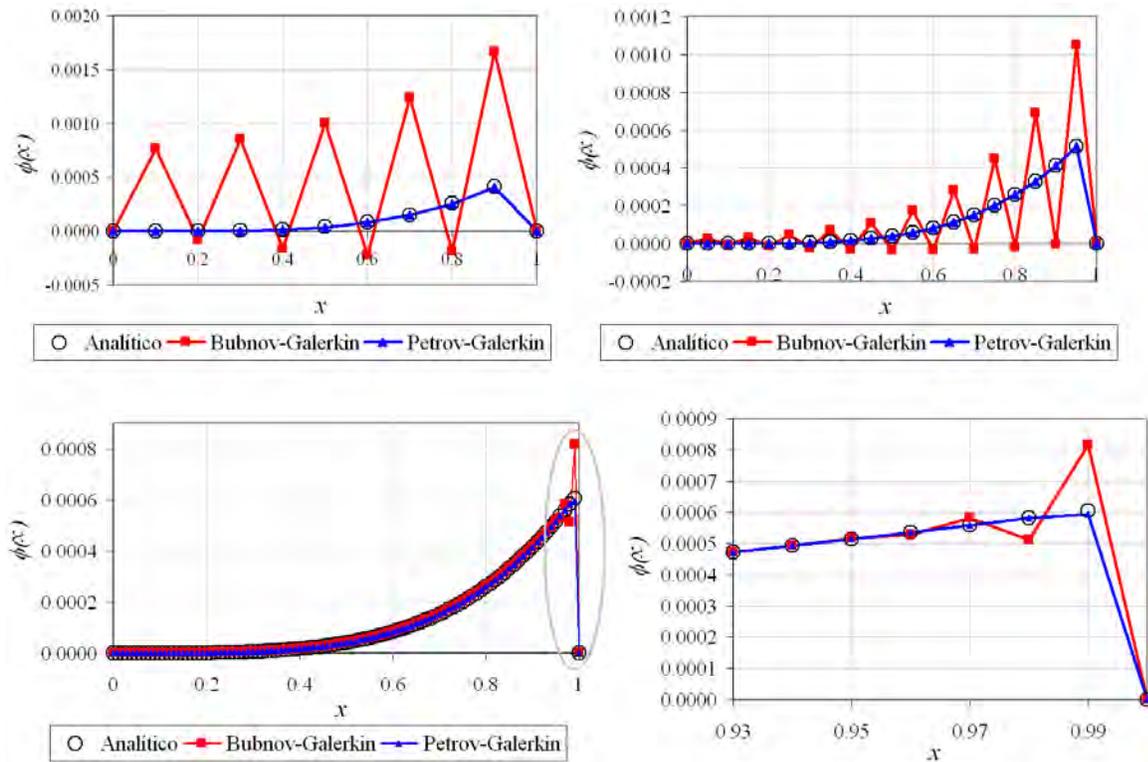


Figura 3.8: Soluciones obtenidas para el caso de estudio 1 empleando el método de estabilización *Petrov-Galerkin* con 10 elementos (arriba-izq.), 20 elementos (arriba-der.) y 100 elementos (abajo).

caracterizado por valores altos en el número de Peclet ($P_e = 7, 5$), lo cual hace que el problema pueda clasificarse como predominantemente advectivo. Las pruebas numéricas realizadas con diferentes valores en el coeficiente de perturbación (α) muestran que se requiere un valor cercano a $\alpha = 0, 9$ para lograr estabilizar la solución empleando el planteamiento de Petrov-Galerkin con funciones de forma lineales y una función de perturbación como la descrita en la expresión 3.2.16. Lo anterior coincide con la expresión 3.7.77, para el cálculo del α_{crit} con términos reactivos. Adicionalmente, se observa como para valores en el coeficiente de perturbación inferiores al valor crítico, la solución no alcanza la estabilización; en tanto que para valores superiores a α_{crit} se obtienen aproximaciones estabilizadas pero poco exactas, la cuales se pueden denominar sobre-perturbadas. Al igual que en el caso anterior, resulta interesante observar como la amplitud de las respuestas no estabilizadas se hacen mas fuertes en las zonas aguas arriba en donde la variación de ϕ se hace mas alta. Así, a medida que se incrementa el valor del coeficiente de perturbación, también se puede ver como se reducen progresivamente las oscilaciones sobre la respuesta, siendo la región cercana a $x = 3$ la ultima en alcanzar la estabilidad. En la Figura 3.11 se observa el comportamiento del error

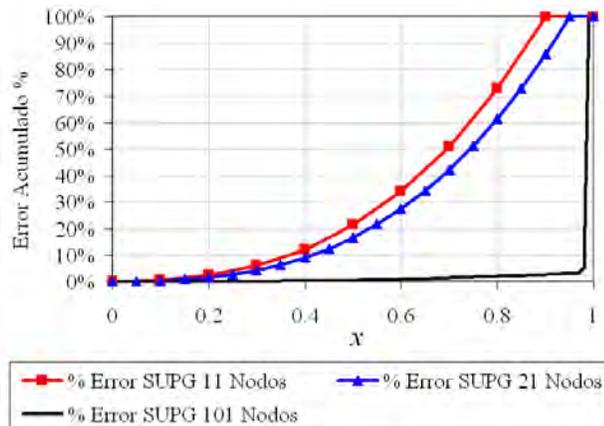


Figura 3.9: Comportamiento del error absoluto acumulado porcentual alcanzado con el método *SUPG* para tres tipos diferentes de malla.

acumulado porcentual para tres valores del coeficiente de perturbación, resulta claro de esta gráfica como para valores diferentes de $\alpha = \alpha_{opt}$ la aproximación puede perder estabilidad (solución sub-perturbada) o exactitud (solución sobre-perturbada).

3.8.3. Caso de estudio 3: Problema de Difusión-Advección-Reacción con coeficientes variables

En este caso se presenta la solución implementada para un problema de Difusión-Advección-Reacción con coeficientes variables, el cual es planteado en la ecuación diferencial 3.8.83, bajo las condiciones de borde descritas en 3.8.84.

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{400}{x} \frac{d\phi}{dx} + \frac{50}{x^2}\phi = x \quad (3.8.83)$$

$$\phi(1) = \phi(3) = 0 \quad (3.8.84)$$

La Figura 3.12 muestra el comportamiento de los números de Peclet y Damkohler para tres tipos de discretización diferentes (10, 100 y 1000 elementos). En la misma gráfica se muestra el comportamiento del valor P_{elim} , obtenido a partir de la expresión 3.7.78, así como también el valor de α_{crit} . Como primer punto se debe resaltar como los valores de σ son muy inferiores que los valores del numero de Peclet, por lo que el fenómeno físico modelado mediante la ecuación diferencial puede ser catalogado, por encima de las componentes difusivas y reactivas, como predominantemente advectivo. Se observa claramente, que solo la discretización con 1000 elementos permite una solución estable y exacta empleando un formulación Bubnov-Galerkin (no se requiere estabilizar pues $P_e < P_{elim}$). Para las otras mallas, en ninguna zona se presentan valores de Peclet inferiores P_{elim} y por tanto se prevén

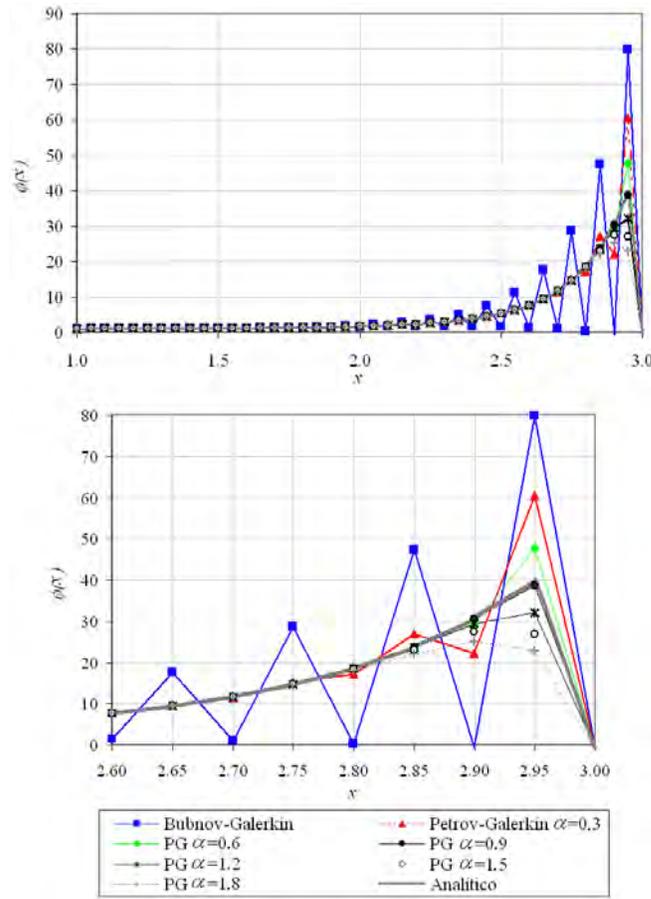


Figura 3.10: Soluciones obtenidas para el caso de estudio 2, empleando Petrov-Galerkin con 40 elementos y diferentes valores de coeficiente de perturbación α .

aproximaciones oscilantes con el método convencional, tal como se puede verificar en la Figura 3.13, en donde se muestran oscilaciones generalizadas sobre todo el dominio para 10 elementos y una oscilación localizada (cerca a $x = 3$) para 100 elementos.

3.8.4. Caso 4: Solución del modelo de Difusión-Advección-Reacción en estado transitorio

En este ejemplo se estudia el comportamiento de la solución *SUPG* para problemas transitorios. La ecuación 3.8.85, junto con las condiciones de borde mostradas en 3.8.86, definen el problema difusivo-advectivo dinámico planteado para en este caso.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{400}{x} \frac{\partial \phi}{\partial x} = x^3 \quad (3.8.85)$$

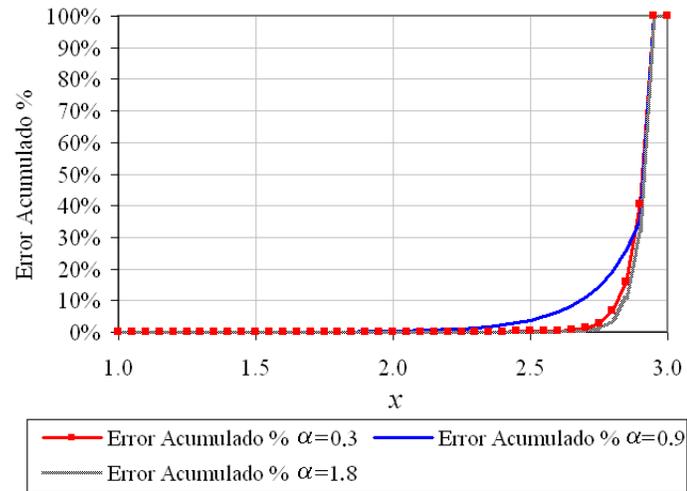


Figura 3.11: Comportamiento del error absoluto acumulado porcentual alcanzado con el método *SUPG* para el caso de estudio 2, con diferentes valores de coeficiente de perturbación α .

$$\phi(1) = \phi(2) = 0 \quad (3.8.86)$$

La solución planteada se desarrolló con 50 elementos e involucró, al igual que en todos los casos anteriores, un planteamiento Bubnov-Galerkin y una aproximación upwind Petrov-Galerkin para el problema espacial. Para la dimensión temporal se empleó una discretización por diferencias finitas del tipo Forward-Euler (como la planteada en 3.6.52), con 50 pasos de tiempo y un tiempo final igual a $t_f = 2,5 \times 10^{-3}$. Se observa en las soluciones alcanzadas, las cuales se ilustran en la Figura 3.14, como las inestabilidades exhibidas por la solución convencional se transmiten a lo largo del tiempo, obteniéndose finalmente una aproximación estacionaria inestable, que muestra oscilaciones que no guardan relación con la naturaleza de la ecuación diferencial, como tampoco con las condiciones iniciales del problema. Entre tanto, la solución *SUPG* muestra una estabilización de la solución para cada paso de tiempo, llevando a una respuesta estacionaria muy aproximada y libre de falsas oscilaciones.

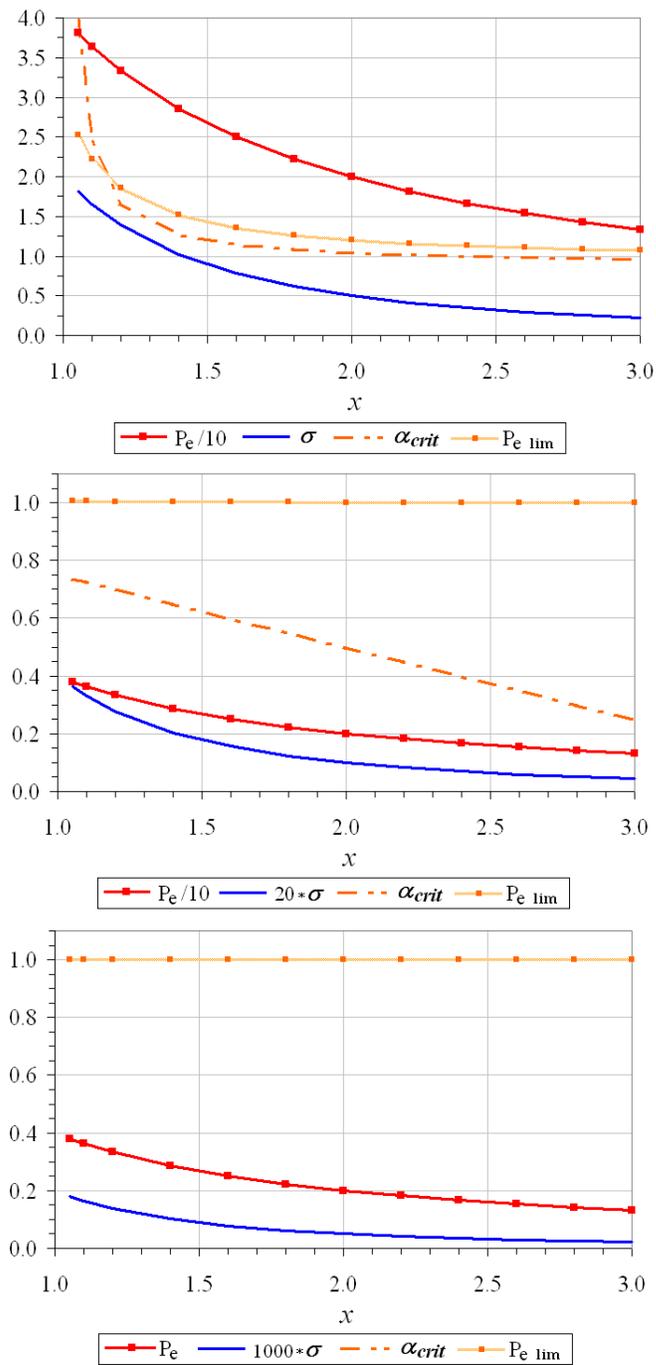


Figura 3.12: Comportamiento de los valores de Peclet, Damkohler, α_{crit} y P_{elim} a lo largo del dominio para el caso de estudio 3, con $h = 0,2$ (arriba), $h = 0,02$ (medio), $h = 0,002$ (abajo).

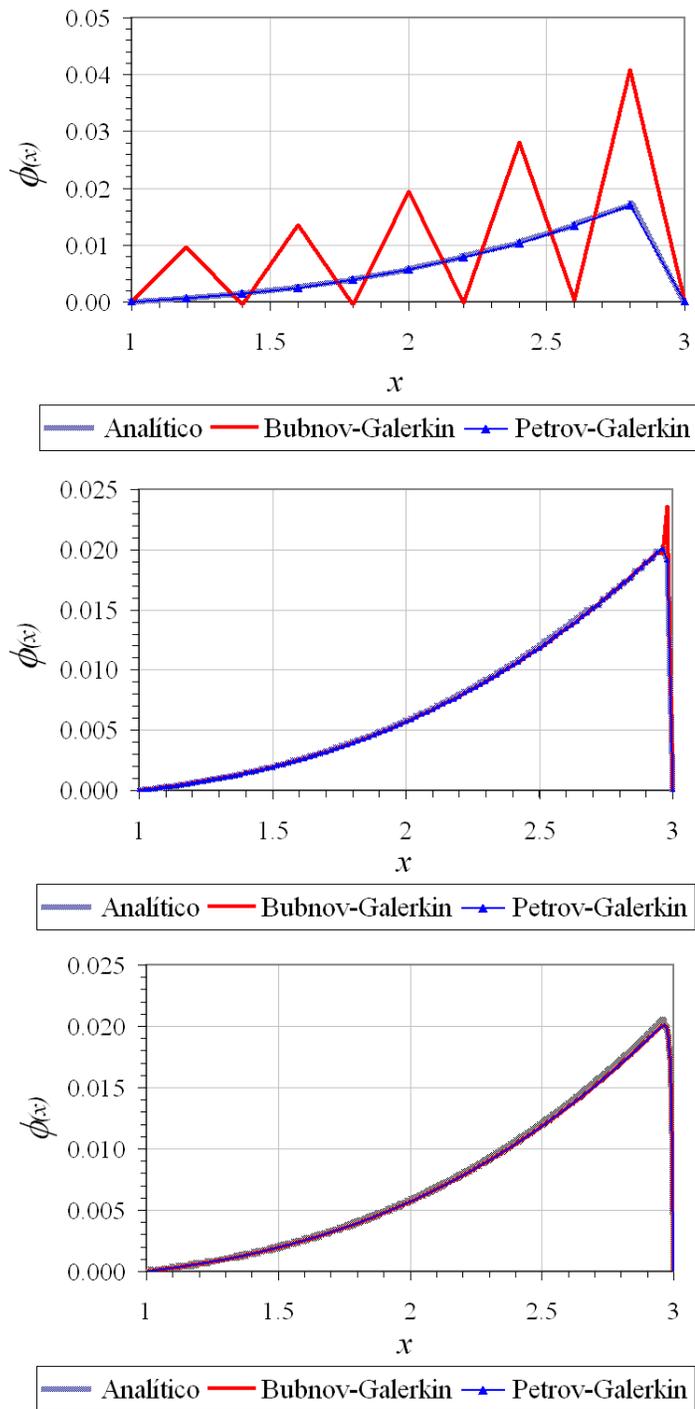


Figura 3.13: Soluciones obtenidas para el caso de estudio 3 empleando Petrov-Galerkin con 10 (arriba), 100 (medio) y 1000 elementos (abajo).

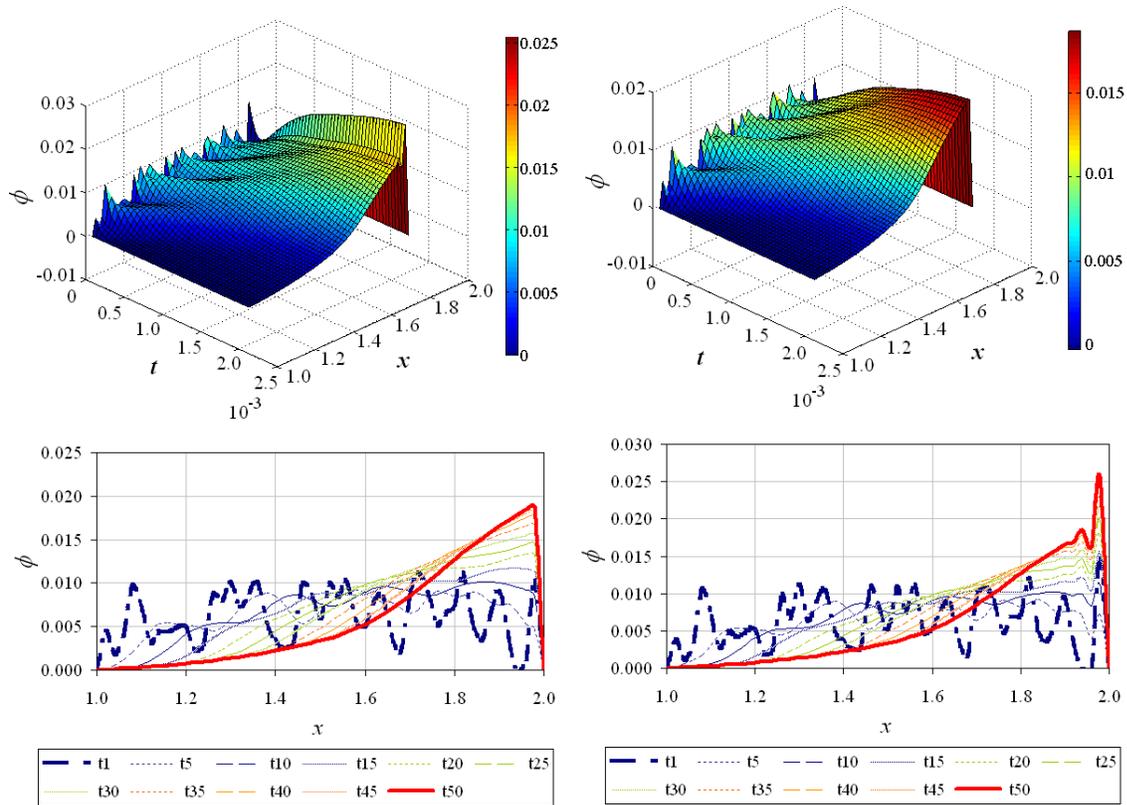


Figura 3.14: Solución transitoria alcanzada con el método Bubnov-Galerkin (izq.) y SUPG (der.) para el caso de estudio 6.

Planteamiento multidimensional del método de Petrov-Galerkin en contracorriente

En el capítulo anterior se plantearon los fundamentos del método *SUPG* para problemas unidimensionales estacionarios y transitorios. En el presente capítulo se analiza la forma en que este método de estabilización puede extenderse a dos o más dimensiones espaciales y se presenta la formulación para un elemento finito cuadrilátero de cuatro nodos. En la parte final del capítulo se presenta un caso de estudio desarrollado en lenguaje *FORTRAN*, bajo la formulación expuesta, y se compara esta aproximación con la solución Bubnov-Galerkin convencional.

4.1. Enfoque bidimensional de la difusión artificial dentro de la técnica *SUPG*

Como ya se mencionó en el capítulo anterior, el método de estabilización *SUPG* puede entenderse como la adición de un término difusivo artificial, planteado en la ecuación 3.5.49, el cual contrarresta la difusión «negativa» generada con la asimetría de la matriz de rigidez. Esta interpretación del método *SUPG*, resulta especialmente útil para la generalización de la técnica a problemas en dos o tres dimensiones. De esta forma, así como en problemas unidimensionales, la modificación de las funciones de peso es equivalente a adicionar un término difusivo adicional que actúa en la dirección de la corriente (ver Figura 3.1.6), para problemas con una o dos dimensiones adicionales, se debe garantizar que el efecto de la difusión artificial actúe contrarrestando el efecto advectivo, el cual solo opera en la dirección de la velocidad \vec{u} [112]. Estabilizar en la dirección transversal a las líneas de corriente implica adicionar una difusión artificial innecesaria sobre esta dirección, reduciendo la exactitud de la aproximación.

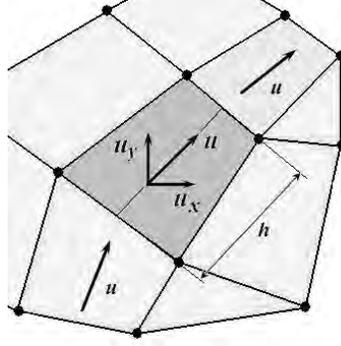


Figura 4.1: Línea de corriente al interior de un elemento bidimensional.

De acuerdo con este planteamiento, una perturbación sobre la función de forma, como la escrita en la ecuación 4.1.1, solo logra estabilizar el efecto advectivo en la dirección x . De forma análoga se podría perturbar la función de ponderación para estabilizar la advección en la dirección y , como se muestra en 4.1.2. No obstante, como la dirección de la línea de corriente suele cambiar de dirección y no coincidir necesariamente con uno de los ejes $x - y$, la perturbación adecuada de la función de peso debe incorporar una ponderación direccional, tal como se plantea en la ecuación 4.1.3 [47].

$$\bar{W}_l = W_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{dW_l}{dx} \quad (4.1.1)$$

$$\bar{W}_l = W_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{dW_l}{dy} \quad (4.1.2)$$

$$\bar{W}_l = W_l + \frac{\alpha h}{2} \left[\frac{u_x}{|u|} \frac{dW_l}{dx} + \frac{u_y}{|u|} \frac{dW_l}{dy} \right] \quad (4.1.3)$$

donde u_x y u_y son las componentes de la velocidad en las direcciones globales $x - y$, y α es el coeficiente de perturbación calculado de acuerdo con 3.4.48, empleando el valor de la norma de la velocidad y una dimensión característica h como la mostrada en la Figura 4.1.

Conociendo la forma como debe ser modificada una función de peso multidimensional dentro del planteamiento de residuos ponderados, puede ahora formularse el método *SUPG* para una ecuación de Difusión-Advección-Reacción multidimensional, como la expresada en 4.1.4.

$$-\nabla \cdot (k \nabla \phi) + \vec{u} \cdot \nabla \phi + s \phi = F(\vec{x}) \quad (4.1.4)$$

La expresión de residuos ponderados de la ecuación 4.1.4, esta dada por 4.1.5:

$$\int_{\Omega} \nabla \bar{W}_l \cdot (k \nabla \phi) d\Omega + \int_{\Omega} \bar{W}_l (\vec{u} \cdot \nabla \phi) d\Omega + \int_{\Omega} \bar{W}_l s \phi d\Omega = \int_{\Omega} \bar{W}_l F(\vec{x}) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{W}_l k \frac{\partial \phi}{\partial n} d\Gamma \quad (4.1.5)$$

donde n representa el vector perpendicular al borde del dominio y $\frac{\partial \phi}{\partial n}$ representa el flujo de ϕ a través de la frontera de Neumann. Incorporando una aproximación a tramos, tal como lo expresa 4.1.6, así como la definición de función de peso corregida alcanzada en 4.1.3, se llega a:

$$\begin{aligned} \sum_e \sum_m \left(\int_{\Omega^e} \nabla \left(N_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y}}{|u|} \right) \cdot (k \nabla N_m) d\Omega^e \right. \\ + \int_{\Omega^e} \left(N_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y}}{|u|} \right) (\vec{u} \cdot \nabla N_m) d\Omega^e \\ + \int_{\Omega^e} \left(N_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y}}{|u|} \right) s N_m d\Omega^e \left. \right) \cdot \phi_m = \\ \int_{\Omega^e} \left(N_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y}}{|u|} \right) F(\vec{x}) d\Omega^e \\ + \int_{\Gamma} \left(N_l + \frac{\alpha h}{2} \frac{u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y}}{|u|} \right) k \frac{\partial \phi}{\partial n} d\Gamma \quad (4.1.6) \end{aligned}$$

El aporte de un elemento al sistema global de ecuaciones esta definido por:

$$([K] + [K_s]) \phi_m = [f] + [f_s] \quad (4.1.7)$$

donde los términos $[K]$ y $[f]$, corresponden a las matrices originales resultantes de aplicar el método Bubnov-Galerkin. En tanto que los términos $[K_s]$ y $[f_s]$ son matrices de estabilización adicionadas por la modificación de la función de peso. A continuación se definen estas cuatro cantidades.

$$\begin{aligned} [K] = \int_{\Omega^e} \left(\frac{\partial N_l}{\partial x} k \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial N_l}{\partial y} k \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) d\Omega^e + \int_{\Omega^e} N_l \left(u_x \frac{\partial N_m}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) d\Omega^e \\ + \int_{\Omega^e} N_l s N_m d\Omega^e \quad (4.1.8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[K_s] &= \int_{\Omega^e} \frac{\alpha h k}{2|u|} \left[u_x \left(\frac{\partial^2 N_l}{\partial x^2} \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial^2 N_l}{\partial x \partial y} \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) + u_y \left(\frac{\partial^2 N_l}{\partial x \partial y} \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial^2 N_l}{\partial y^2} \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) \right] d\Omega^e \\
&+ \int_{\Omega^e} \frac{\alpha h k}{2|u|} \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial N_m}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial y} \right] d\Omega^e \\
&+ \int_{\Omega^e} \frac{\alpha h k}{2|u|^2} \left[\left(u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial |u|}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial |u|}{\partial y} \right) \right] d\Omega^e \\
&+ \int_{\Omega^e} \left[u_x^2 \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_x u_y \left(\frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial x} + \frac{\partial N_m}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) + u_y^2 \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} \right] d\Omega^e \\
&+ \int_{\Omega^e} \frac{\alpha h s}{2|u|} \left(u_x N_m \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y N_m \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) d\Omega^e \quad (4.1.9)
\end{aligned}$$

$$[f] = \int_{\Omega^e} N_l F(\vec{x}) d\Omega^e + \int_{\Gamma} N_l k \frac{\partial \phi}{\partial n} d\Gamma \quad (4.1.10)$$

$$[f_s] = \int_{\Omega^e} \frac{\alpha h F(\vec{x})}{2|u|} \left(u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) d\Omega^e + \int_{\Gamma} \frac{\alpha h k}{2|u|} \left(u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) \frac{\partial \phi}{\partial n} d\Gamma \quad (4.1.11)$$

4.2. Formulación de un elemento cuadrilátero bidimensional para la solución de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción

Las expresiones 4.1.8 a 4.1.11 se encuentran escritas en coordenadas globales, así que con el fin de simplificar el cálculo del aporte de cada elemento del dominio, resulta conveniente expresar estas ecuaciones en términos de las coordenadas locales del elemento. En la Figura 4.2 se muestra un elemento cuadrilátero en coordenadas locales, en tanto que en la ecuación 4.2.12, se presentan las funciones de forma en coordenadas locales para un elemento cuadrilátero.

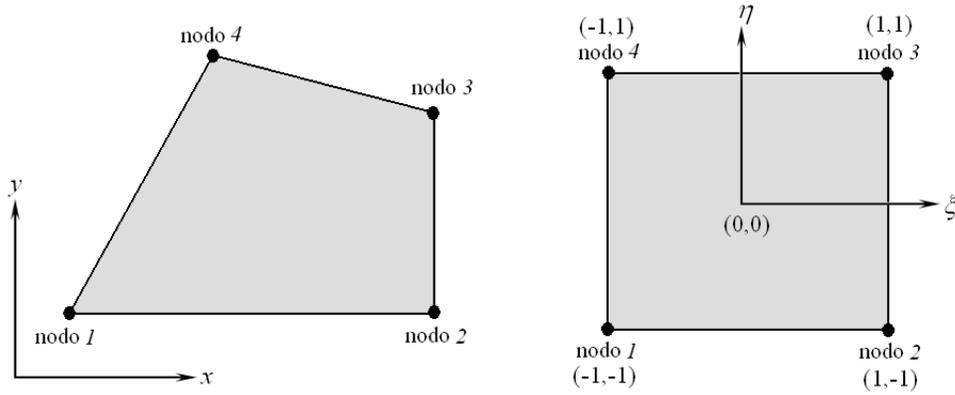


Figura 4.2: Elemento cuadrilátero de cuatro nodos (izq.) y coordenadas locales para un elemento cuadrilátero (der.).

$$\begin{aligned}
 N_1 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\
 N_2 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\
 N_3 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \\
 N_4 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta)
 \end{aligned} \tag{4.2.12}$$

Así, para un elemento isoparamétrico, las coordenadas globales se pueden expresar en términos de las coordenadas locales, empleando las mismas funciones de interpolación utilizadas para la aproximación de la función ϕ , tal como se muestra en 4.2.13:

$$\begin{aligned}
 x(\xi, \eta) &= N_1x_1 + N_2x_2 + N_3x_3 + N_4x_4 \\
 y(\xi, \eta) &= N_1y_1 + N_2y_2 + N_3y_3 + N_4y_4
 \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

Las derivadas de las funciones de forma, involucradas en las expresiones 4.1.8 a 4.1.11, deben ser expresados en coordenadas locales, por lo que resulta necesario plantear:

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{\partial N}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = N_\xi \xi_x + N_\eta \eta_x \tag{4.2.14}$$

$$\frac{\partial N}{\partial y} = N_\xi \xi_y + N_\eta \eta_y \tag{4.2.15}$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} = N_\xi \xi_{xx} + N_\eta \eta_{xx} + 2N_{\xi\eta} \xi_x \eta_x \tag{4.2.16}$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial y^2} = N_\xi \xi_{yy} + N_\eta \eta_{yy} + 2N_{\xi\eta} \xi_y \eta_y \quad (4.2.17)$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial x \partial y} = N_\xi \xi_{xy} + N_\eta \eta_{xy} + 2N_{\xi\eta} (\xi_x \eta_y + \xi_y \eta_x) \quad (4.2.18)$$

en donde las derivadas $\xi_x, \xi_y, \xi_{xx}, \xi_{yy}, \xi_{xy}, \eta_x, \eta_y, \eta_{xx}, \eta_{yy}, \eta_{xy}$, se obtienen empleando una transformación Jacobiana, tal como se plantea en las expresiones 4.2.19 a 4.2.24. Nótese que se emplean subíndices para denotar derivación con respecto a una variable dada.

$$\begin{bmatrix} \eta_x \\ \eta_y \end{bmatrix} = \frac{1}{|J|} \begin{bmatrix} -y\xi \\ x\xi \end{bmatrix} \quad (4.2.19)$$

$$\begin{bmatrix} \eta_{xx} \\ \eta_{xy} \end{bmatrix} = \frac{1}{|J|^3} \begin{bmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |J| \xi_y \xi \\ |J| \eta_y \xi - |J| y \xi_\eta \end{bmatrix} \quad (4.2.20)$$

$$\begin{bmatrix} \eta_{yx} \\ \eta_{yy} \end{bmatrix} = \frac{1}{|J|^3} \begin{bmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -|J| \xi_x \xi \\ |J| x \xi_\eta - |J| \eta_x \xi \end{bmatrix} \quad (4.2.21)$$

$$\begin{bmatrix} \xi_x \\ \xi_y \end{bmatrix} = \frac{1}{|J|} \begin{bmatrix} y_\eta \\ -x_\eta \end{bmatrix} \quad (4.2.22)$$

$$\begin{bmatrix} \xi_{xx} \\ \xi_{xy} \end{bmatrix} = \frac{1}{|J|^3} \begin{bmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |J| y_\eta \xi - |J| \xi_y \eta \\ -|J| \eta_y \xi \end{bmatrix} \quad (4.2.23)$$

$$\begin{bmatrix} \xi_{yx} \\ \xi_{yy} \end{bmatrix} = \frac{1}{|J|^3} \begin{bmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |J| \xi_x \eta - |J| x_\eta \xi \\ |J| \eta_x \xi \end{bmatrix} \quad (4.2.24)$$

Para las expresiones anteriores, J es la matriz Jacobiana definida en 4.2.25 para un elemento rectangular lineal como el de la Figura 4.2.

$$J = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} J_{11} &= \frac{1}{4} \left(-(1-\eta)x_1 + (1-\eta)x_2 + (1+\eta)x_3 - (1+\eta)x_4 \right) \\ J_{12} &= \frac{1}{4} \left(-(1-\eta)y_1 + (1-\eta)y_2 + (1+\eta)y_3 - (1+\eta)y_4 \right) \\ J_{21} &= \frac{1}{4} \left(-(1-\xi)x_1 - (1+\xi)x_2 + (1+\xi)x_3 + (1-\xi)x_4 \right) \\ J_{22} &= \frac{1}{4} \left(-(1-\xi)y_1 - (1+\xi)y_2 + (1+\xi)y_3 + (1-\xi)y_4 \right) \end{aligned} \quad (4.2.25)$$

Reemplazando las expresiones 4.2.19 a 4.2.24 en las ecuaciones 4.2.14 a 4.2.18, se obtienen las expresiones incluidas en 4.2.26 a 4.2.30, las cuales se emplean para el cálculo de las matrices de las ecuaciones 4.1.8 a 4.1.11.

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{1}{|J|} \left(N_\xi J_{22} - N_\eta J_{12} \right) \quad (4.2.26)$$

$$\frac{\partial N}{\partial y} = \frac{1}{|J|} \left(N_\eta J_{11} - N_\xi J_{21} \right) \quad (4.2.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} &= \frac{N_\xi J_{22}}{|J|^3} \left(J_{12} |J|_\eta - J_{22} |J|_\xi + |J| (J_{22})_\xi \right) \\ &+ \frac{N_\eta J_{12}}{|J|^3} \left(J_{22} |J|_\xi - J_{12} |J|_\eta + |J| (J_{12})_\eta \right) \\ &- \frac{2}{|J|^2} N_{\xi\eta} J_{22} J_{12} \end{aligned} \quad (4.2.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} &= \frac{N_\xi J_{21}}{|J|^3} \left(J_{11} |J|_\eta - J_{21} |J|_\xi + |J| (J_{21})_\xi \right) \\ &+ \frac{N_\eta J_{11}}{|J|^3} \left(J_{21} |J|_\xi - J_{11} |J|_\eta + |J| (J_{11})_\eta \right) \\ &- \frac{2}{|J|^2} N_{\xi\eta} J_{21} J_{11} \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 N}{\partial x \partial y} &= - \frac{N_\xi}{|J|^3} \left[J_{21} \left(|J| (J_{22})_\xi - |J|_\xi J_{22} \right) + J_{11} |J|_\eta J_{22} \right] \\ &+ \frac{N_\eta}{|J|^3} \left[J_{11} \left(|J|_\eta J_{12} - |J| (J_{12})_\eta \right) + J_{21} |J|_\xi J_{12} \right] \\ &+ \frac{N_{\xi\eta}}{|J|^2} \left(J_{22} J_{11} + J_{12} J_{21} \right) \end{aligned} \quad (4.2.30)$$

Para estas últimas ecuaciones, las expresiones $|J|$, $|J|_\xi$, $|J|_\eta$, $(J_{11})_\eta$, $(J_{12})_\eta$, $(J_{21})_\xi$, $(J_{22})_\xi$, se especifican a continuación en términos de las coordenadas nodales del elemento. Los términos $(J_{11})_\xi$, $(J_{12})_\xi$, $(J_{21})_\eta$, $(J_{22})_\eta$ son iguales a cero.

$$\begin{aligned} |J| &= \frac{1}{8} \left[(1 - \xi)x_4 y_1 + (1 - \eta)x_1 y_2 + (\xi + \eta)x_4 y_2 + (\eta - \xi)x_1 y_3 - (1 + \eta)x_4 y_3 \right. \\ &+ (\xi - 1)x_1 y_4 + x_3 \left((\xi - \eta)y_1 - (1 + \xi)y_2 + (1 + \eta)y_4 \right) \\ &\left. + x_2 \left((\eta - 1)y_1 + (1 + \xi)y_3 - (\eta + \xi)y_4 \right) \right] \end{aligned} \quad (4.2.31)$$

$$|J|_\xi = \frac{1}{8} \left(x_3(y_1 - y_2) + x_4(y_2 - y_1) - (x_1 - x_2)(y_3 - y_4) \right) \quad (4.2.32)$$

$$|J|_{\eta} = \frac{1}{8} \left(x_3(y_4 - y_1) + x_2(y_1 - y_4) - (x_1 - x_4)(y_2 - y_3) \right) \quad (4.2.33)$$

$$(J_{11})_{\eta} = \frac{1}{4} (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \quad (4.2.34)$$

$$(J_{12})_{\eta} = \frac{1}{4} (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \quad (4.2.35)$$

$$(J_{21})_{\xi} = \frac{1}{4} (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \quad (4.2.36)$$

$$(J_{22})_{\xi} = \frac{1}{4} (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \quad (4.2.37)$$

4.3. Ejemplo de aplicación del método *SUPG* en un problema estacionario bidimensional

El caso de estudio que se presenta (ver Figura 4.3), denominado ejemplo de Brezzi [14], es un problema comúnmente empleado para evaluar técnicas de estabilización de la ecuación diferencial de Difusión-Advección. La ecuación diferencial que modela este problema esta definida en 4.3.38.

$$-0,005 \nabla \cdot \nabla \phi + \vec{u}(x, y) \nabla \phi = 0 \quad (4.3.38)$$

Sujeta a las condiciones de borde mostradas en la Figura 4.3, con $\vec{u}(x, y) = [-y, x]$.

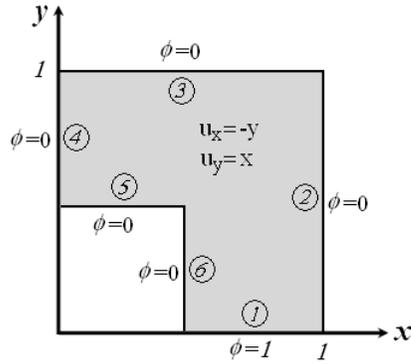


Figura 4.3: Definición del dominio y condiciones de borde para el caso de estudio.

Este caso representa un problema de alta complejidad debido a la presencia de zonas de alto gradiente de ϕ en áreas ubicadas aguas abajo (cercanas a lados 3 y 4 del dominio), así como una zona en la que se combina un punto de singularidad y altos valores en el

gradiente de la función (vértice formado por los lados 5 y 6).

La Figura 4.4 muestra los resultados obtenidos para una malla de 7500 elementos (tamaño promedio $h = 0,01$), empleando tanto el método de Bubnov-Galerkin, como la técnica de estabilización *SUPG*. Se observa que para este tamaño de malla los números de Peclet alcanzados son relativamente bajos en todo el dominio ($Pe < 1,4$), especialmente en la zona aguas abajo o zona de salida del flujo (lado 4 del dominio), en donde se alcanzan valores de iguales a la unidad (ver Figura 4.5). Por lo anterior, es de esperarse que ambos modelos proporcionen soluciones similares, lo cual se evidencia al observar la gráfica de convergencia de la norma de energía mostrada en la Figura 4.6.

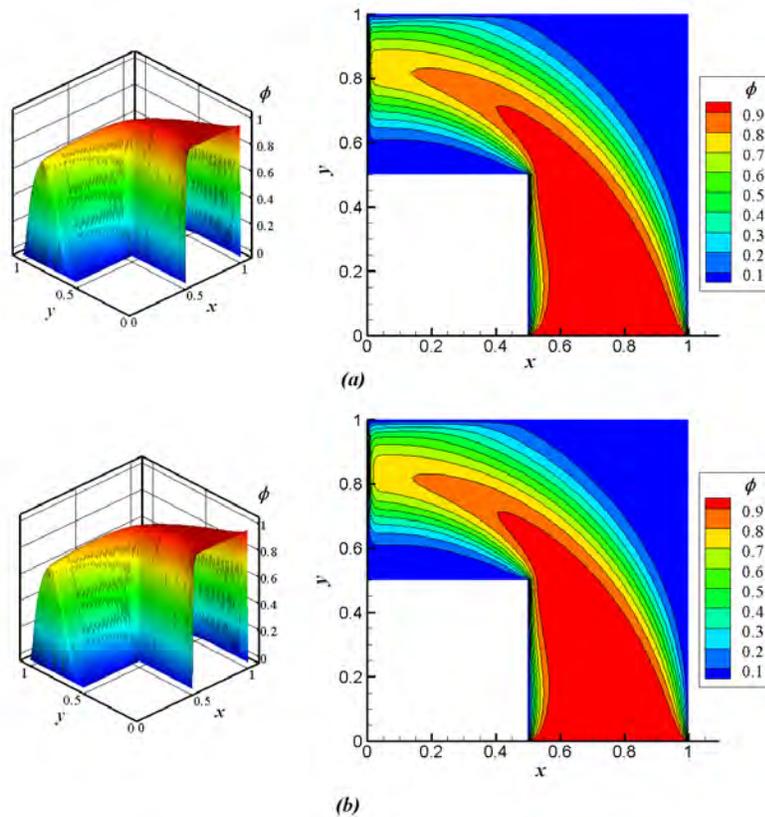


Figura 4.4: Solución numérica obtenida con Bubnov-Galerkin (a) y Petrov-Galerkin (b), para una malla de elementos rectangulares con $h = 0,01$.

En la Figura 4.7 se observa la solución obtenida empleando ambas formulaciones y una malla con 507 elementos (tamaño promedio $h = 0,04$). Esta figura muestra como la aproximación convencional exhibe una fuerte oscilación en la zona de salida del fluido (lado 4 del dominio), en donde se localiza un alto gradiente de la función o capa límite de salida, junto

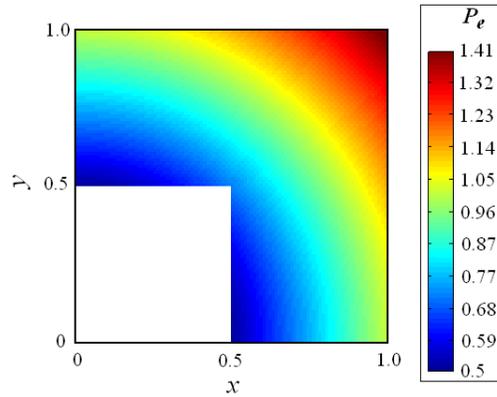


Figura 4.5: Comportamiento del número de Peclet al interior del dominio del problema para $h = 0,01$.

con un número de Peclet superior a dos. De igual forma se observa una oscilación localizada en el vértice interno del dominio o punto de singularidad, en donde también se puede ver la presencia de capa límite. Estas oscilaciones espurias, sustentadas en el comportamiento del número de Peclet al interior del dominio (ver Figura 4.8), desaparecen empleando la técnica de estabilización *SUPG*. La gráfica de convergencia de la Figura 4.6 muestra que la norma de energía de la solución alcanzada por *SUPG* se encuentra más cercana al valor de convergencia que la norma calculada con la solución convencional.

La Figura 4.9 presenta la aproximación alcanzada para este caso empleando las dos formulaciones y una malla con 108 elementos (tamaño promedio $h = 0,09$). Se puede apreciar el incremento en los picos de las oscilaciones ya existentes en la solución convencional de la Figura 4.7, así como la aparición de una oscilación adicional en la región aguas abajo, cercana al lado 4 del dominio. Este incremento en las oscilaciones se explica al observar el aumento en los números de Peclet, los cuales en las zonas de las oscilaciones son superiores a cinco. Aún para estos elevados número de Peclet, estas oscilaciones son evitadas cuando se emplea la técnica de estabilización *SUPG*. En la Figura 4.6 se puede evaluar un aumento en la diferencia entre los valores de las normas de energía alcanzadas con las dos soluciones, así como el distanciamiento de la norma calculada con Bubnov-Galerkin del valor de convergencia.

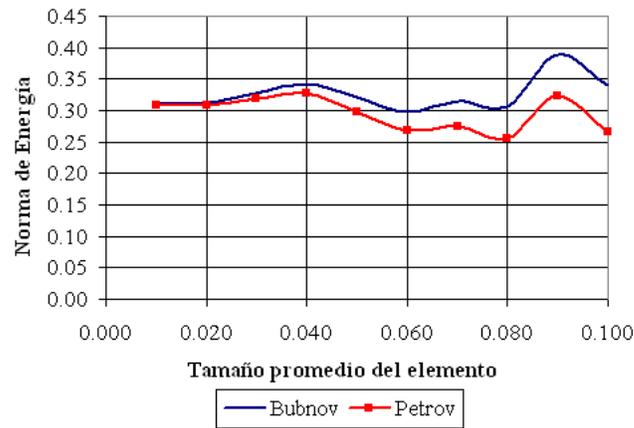


Figura 4.6: Gráfica de convergencia de la norma de energía en términos del tamaño promedio de elemento.

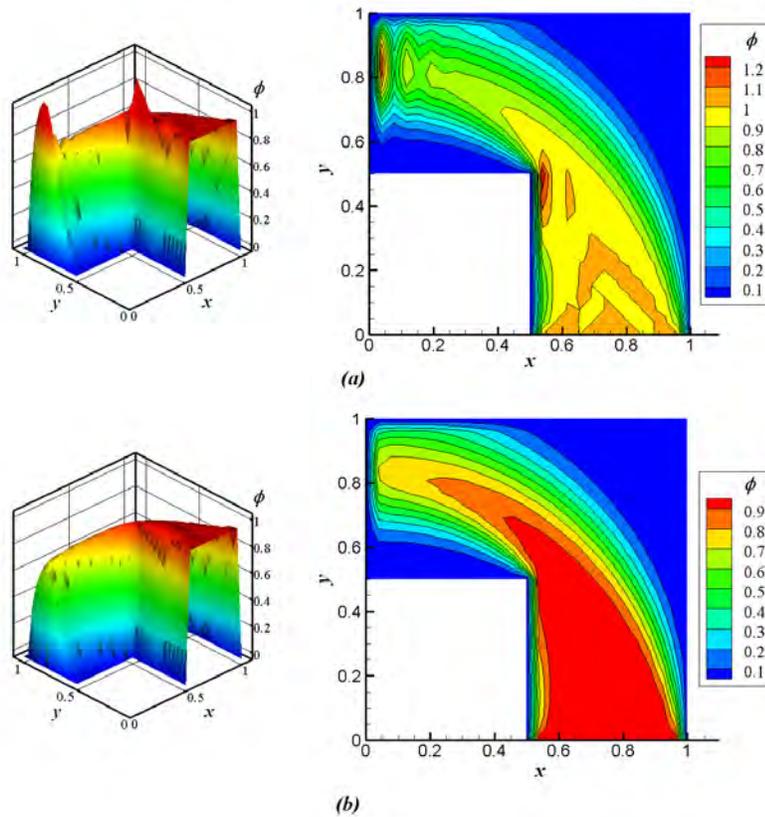


Figura 4.7: Solución numérica obtenida con Bubnov-Galerkin (a) y Petrov-Galerkin (b), para una malla de elementos rectangulares con $h = 0,04$.

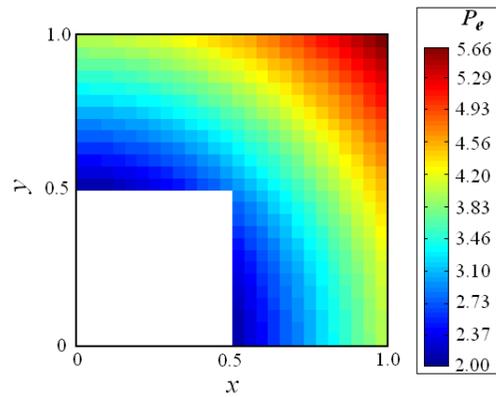


Figura 4.8: Comportamiento del número de Peclet al interior del dominio del problema para $h = 0,04$.

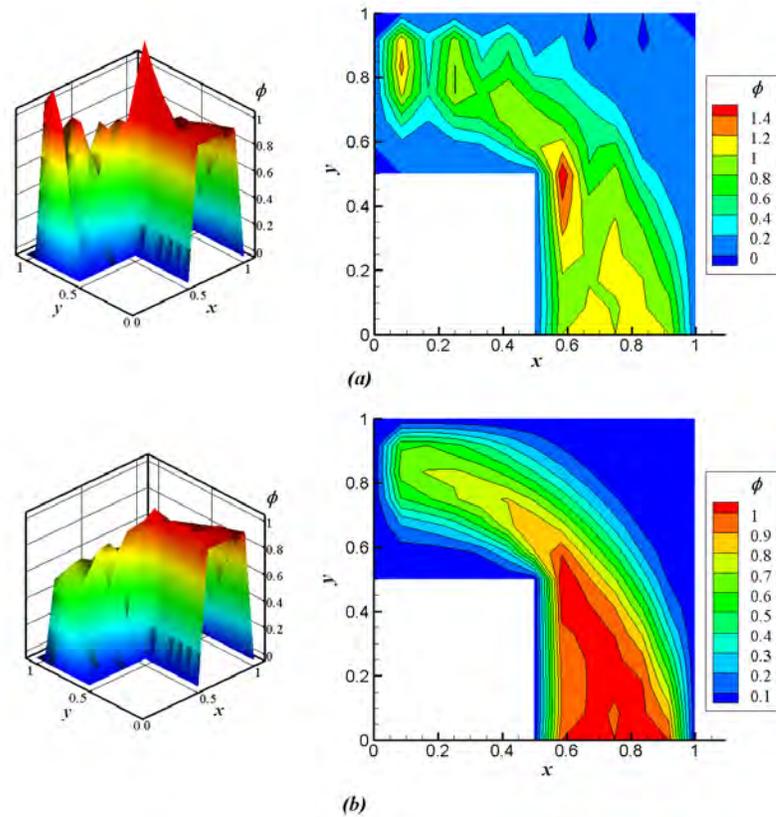


Figura 4.9: Solución numérica obtenida con Bubnov-Galerkin (a) y Petrov-Galerkin (b), para una malla de elementos rectangulares con $h = 0,09$.

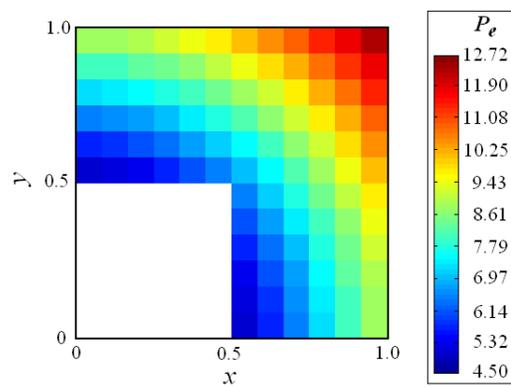


Figura 4.10: Comportamiento del número de Peclet al interior del dominio del problema para $h = 0,09$.

Capítulo 5

Formulación del método de Galerkin sobre líneas características en la solución de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción

En los capítulos anteriores se describió y aplicó el método de Petrov-Galerkin en contracorriente para estabilizar la solución por elementos finitos de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción. En el presente capítulo se plantea el método de las líneas características como técnica de estabilización del mismo problema. Empleando este último método, se construye una formulación para un elemento finito cuadrilátero de cuatro nodos, la cual es programada en lenguaje *FORTRAN* para el desarrollo de dos casos de estudio. En la parte final del capítulo, se comparan los resultados obtenidos, para los dos casos de estudio mencionados, con la técnica *SUPG* y el método de las líneas características.

5.1. Planteamiento unidimensional del método de líneas características

La solución a la ecuación Difusión-Advección resulta ser un problema de propagación de una onda que se atenúa por el efecto difusivo. Desde este punto de vista, un cambio a un sistema de referencia móvil, permitirá enfocar el problema de una forma más simple eliminando el término de transporte. Así pues, partiendo de la ecuación diferencial de Difusión-Advección unidimensional 5.1.1:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = F(x) \quad (5.1.1)$$

se observa que aplicando un enfoque lagrangiano, por medio del cambio de variable 5.1.2 [52]:

$$x' = x - ut \quad (5.1.2)$$

permite obtener una ecuación diferencial en términos de la coordenada móvil x' 5.1.3:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x'} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x'} \right) = F(x') \quad (5.1.3)$$

Nótese en esta última ecuación que el término convectivo ha desaparecido (ver Figura 5.1), es decir, a la luz del sistema coordenado móvil x' la onda no se transporta [52]. Esta simplificación, bajo enfoque numérico, representa una importante ventaja, pues se ha eliminado el término no-autoadjunto y el empleo de técnicas convencionales sin estabilización resultan ahora adecuadas y suficientes.

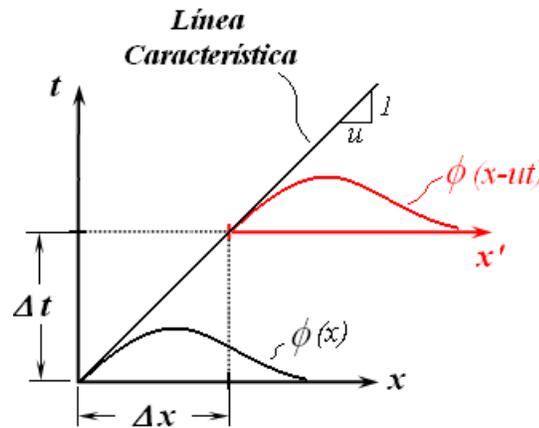


Figura 5.1: Efecto del enfoque lagrangiano en el planteamiento de un problema de propagación de onda.

Así entonces, el planteamiento de la ecuación de la línea característica resulta, para problema unidimensionales, importante para alcanzar una solución analítica a este tipo de problemas de transporte de onda. Se analizará ahora la forma como el concepto de la línea característica puede ser acondicionado dentro de un método discreto como el método de los elementos finitos.

5.2. Planteamiento unidimensional del método de Galerkin a lo largo de líneas características

Tal como se analizó en los dos capítulos previos, la técnica de estabilización con *SUPG* puede concebirse desde problemas estacionarios. La implementación del término temporal se realizó empleando una discretización por diferencias finitas explícitas, implícitas o semi-implícitas. Sin embargo uno de los problemas de esta solución se encontró en el carácter asimétrico de la matriz de masa $[M]$, otorgado por el término de estabilización incorporado

a la solución, tal como se puede ver en 3.6.61. Esta limitante del método motiva la exploración de otras técnicas para la solución del problemas de Difusión-Advección. Se hará uso ahora del método de el enfoque lagrangiano y las líneas características para formular un una solución por elementos finitos al problema en cuestión.

Como ya se mostró, el empleo de un enfoque lagrangiano (sistema coordenado móvil) permite eliminar de la ecuación el término de transporte no-autoadjunto. No obstante, el empleo de enfoques lagrangianos dentro de soluciones discretas impone la necesidad de realizar una actualización de la malla en cada paso de tiempo, lo cual hace que no sea una salida computacionalmente económica [86]. Más aún, en problemas bidimensionales y tridimensionales, el movimiento de los nodos puede llevar a obtener mallas extremadamente distorsionadas que reduzcan la exactitud del método o lleven a la obtención de matrices singulares [112]. Numerosos trabajos, como los presentados en [70; 10; 76; 11; 75], entre otros, han explorado técnicas para incorporar el enfoque lagrangiano evitando la actualización de la malla. Sin embargo muchos de estos resultan excesivamente complejos de programar.

El método que se presenta a continuación, fue introducido por [111] y emplea un desarrollo en series de Taylor para evitar el requerimiento de actualización de malla, consiguiendo simpleza en la formulación. Partiendo de la expresión de la ecuación diferencial sobre la línea característica 5.2.4:

$$\frac{\partial\phi(x'(t), t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x'} \left(k \frac{\partial\phi(x'(t), t)}{\partial x'} \right) - F(x') = 0 \quad (5.2.4)$$

se puede emplear una discretización en el tiempo por diferencias finitas, tal como la presentada en 3.6.51, lo cual genera la expresión 5.2.5:

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n|_{(x-\delta)}}{\Delta t} = \theta \left[\frac{\partial}{\partial x'} \left(k \frac{\partial\phi(x'(t), t)}{\partial x'} \right) + F(x') \right]^{n+1} \\ (1 - \theta) \left[\frac{\partial}{\partial x'} \left(k \frac{\partial\phi(x'(t), t)}{\partial x'} \right) + F(x') \right]_{(x-\delta)}^n \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

en donde δ se puede expresar como el producto de la velocidad media \bar{u} y el incremento de tiempo (Δt):

$$\delta = \bar{u}\Delta t \quad (5.2.6)$$

Como se observa en la ecuación 5.2.5, la evaluación de esta expresión requiere el cálculo de términos en la posición $x - \delta$ y en la posición x . Una forma sencilla de evitar la necesidad de una actualización en la malla, se trata de emplear una aproximación de los términos evaluados en $x - \delta$ por medio de una serie de Taylor hacia atrás centrada en x , tal como se muestra en las expresiones 5.2.7, 5.2.8 y 5.2.9.

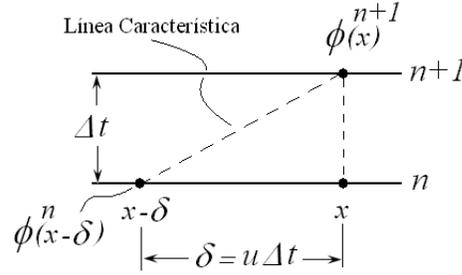


Figura 5.2: Movimiento del sistema coordenado para el método de Galerkin sobre líneas características.

$$\phi^n \Big|_{(x-\delta)} = \phi^n - \delta \frac{\partial \phi^n}{\partial x} + \frac{\delta^2}{2} \frac{\partial^2 \phi^n}{\partial x^2} + O(\delta^3) \quad (5.2.7)$$

$$\frac{1}{2} F \Big|_{(x-\delta)} = \frac{F^n}{2} - \frac{\delta}{2} \frac{\partial F^n}{\partial x} + O(\delta^2) \quad (5.2.8)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \Big|_{(x-\delta)} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^n - \frac{\delta}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^n \right] + O(\delta^2) \quad (5.2.9)$$

Incorporando los resultados de estas últimas tres expresiones en la ecuación 5.2.5, y teniendo en cuenta que el avance δ puede ser aproximado a través de la ecuación 5.2.10 [107], se llega a la ecuación 5.2.11, en la cual todos los términos están referidos a la posición x .

$$\bar{u} = u^n - u^n \Delta t \frac{\partial u^n}{\partial x} \quad (5.2.10)$$

$$\begin{aligned} \phi^{n+1} - \phi^n = \Delta t & \left[\theta \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi^{n+1}}{\partial x} \right) + (1-\theta) \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \right) - u^n \frac{\partial \phi^n}{\partial x} + \theta F^{n+1} + (1-\theta) F^n \right] \\ & - \Delta t^2 \left[(1-\theta) u^n \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(k \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left((u^n)^2 \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \right) + (1-\theta) u^n \frac{\partial F^n}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (5.2.11)$$

Aplicando residuos ponderados, con una ponderación convencional tipo Bubnov-Galerkin, de la anterior ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} W(\phi^{n+1} - \phi^n) d\Omega = & \\
& \Delta t \left[\theta \int_{\Omega} W \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi^{n+1}}{\partial x} \right) d\Omega + (1 - \theta) \int_{\Omega} W \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \right) d\Omega \right. \\
& \left. - \int_{\Omega} W u^n \frac{\partial \phi^n}{\partial x} d\Omega + \theta \int_{\Omega} W F^{n+1} d\Omega + (1 - \theta) \int_{\Omega} W F^n d\Omega \right] \\
& - \Delta t^2 \left[(1 - \theta) \int_{\Omega} W u^n \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(k \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \right) d\Omega - \frac{1}{2} \int_{\Omega} W \frac{\partial}{\partial x} \left((u^n)^2 \frac{\partial \phi^n}{\partial x} \right) d\Omega \right. \\
& \left. + (1 - \theta) \int_{\Omega} W u^n \frac{\partial F^n}{\partial x} d\Omega \right] \quad (5.2.12)
\end{aligned}$$

Debilitando la expresión anterior, despreciando los términos de orden superior y suponiendo una aproximación a tramos, como la definida en 5.2.13, se llega a la ecuación 5.2.14:

$$\phi^e = \sum_m N_m \phi_m \quad (5.2.13)$$

$$\begin{aligned}
\sum_m \int_{\Omega^e} N_l N_m dx (\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) = & \\
& \Delta t \left[-\theta \left(\int_{\Omega^e} \frac{\partial N_l}{\partial x} k \frac{\partial N_m}{\partial x} dx \right) \phi_m^{n+1} - (1 - \theta) \left(\int_{\Omega^e} \frac{\partial N_m}{\partial x} k \frac{\partial N_m}{\partial x} dx \right) \phi_m^n \right. \\
& \left. - \left(\int_{\Omega^e} N_l u^n \frac{\partial N_m}{\partial x} dx \right) \phi_m^n + \theta \int_{\Omega^e} N_l F^{n+1} dx + (1 - \theta) \int_{\Omega^e} N_l F^n dx \right] \\
& - \Delta t^2 \left[\frac{1}{2} \left(\int_{\Omega^e} \frac{\partial N_l}{\partial x} \left((u^n)^2 \frac{\partial N_m}{\partial x} \right) dx \right) \phi_m^n - (1 - \theta) \int_{\Omega^e} F^n \frac{\partial (u^n N_l)}{\partial x} dx \right] + T.C \quad (5.2.14)
\end{aligned}$$

donde $T.C$ se refiere a los términos de contorno que aparecen al debilitar la expresión, los cuales están definidos por 5.2.15:

$$T.C = \Delta t \left[\theta \left(N_l k \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^{n+1} \right) + (1 - \theta) \left(N_l k \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^n \right) \right] \Gamma + \Delta t^2 \left[\frac{1}{2} N_l (u^n)^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^n - u^n N_l F^n \right] \Gamma \quad (5.2.15)$$

En forma resumida el aporte de un elemento al sistema global de ecuaciones algebraicas lineales esta definido por 5.2.16:

$$\begin{aligned}
[M](\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) &= -\Delta t[K](\theta\phi_m^{n+1} + (1-\theta)\phi_m^n) - \Delta t[C]^n\phi_m^n \\
&\quad + \Delta t(\theta[f]^{n+1} + (1-\theta)[f]^n) - \frac{\Delta t^2}{2}[C_s]^n\phi_m^n + \Delta t^2(1-\theta)[f_s]^n + T.C \quad (5.2.16)
\end{aligned}$$

donde:

$$[M] = \int_{\Omega^e} N_l N_m dx \quad (5.2.17)$$

$$[K] = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_l}{\partial x} k \frac{\partial N_m}{\partial x} dx \quad (5.2.18)$$

$$[C]^n = \int_{\Omega^e} N_l u^n \frac{\partial N_m}{\partial x} dx \quad (5.2.19)$$

$$[C_s]^n = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_l}{\partial x} \left((u^n)^2 \frac{\partial N_m}{\partial x} \right) dx \quad (5.2.20)$$

$$[f]^n = \int_{\Omega^e} N_l F^n dx \quad (5.2.21)$$

$$[f]^{n+1} = \int_{\Omega^e} N_l F^{n+1} dx \quad (5.2.22)$$

$$[f_s]^n = \int_{\Omega^e} F^n \frac{\partial (u^n N_l)}{\partial x} dx \quad (5.2.23)$$

Es de observar que la matriz de masa $[M]$ obtenida por este método es simétrica y que los términos $[K]$, $[C]$ y $[f]$ son similares a los obtenidos al solucionar la ecuación diferencial por el método Bubnov-Galerkin. Por otra parte, los términos $[K_s]$ y $[f_s]$, son matrices de estabilización propias del método Galerkin sobre líneas características. Más adelante se mostrará que bajo ciertas consideraciones, estas matrices de estabilización coinciden con las del método *SUPG*.

Para un planteamiento totalmente explícito con $\theta = 1$, la expresión 5.2.16, se simplifica en la ecuación 5.2.24. La simplicidad de este planteamiento explícito se contrasta con la estabilidad condicionada al paso de tiempo Δt empleado para la discretización temporal.

$$[M](\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) = -\left(\Delta t[K] + \Delta t[C]^n + \frac{\Delta t^2}{2}[C_s]^n \right) \phi_m^n + \Delta t[f]^n + \Delta t^2[f_s]^n + T.C \quad (5.2.24)$$

La condición de estabilidad de la aproximación 5.2.24, de acuerdo con [112], esta dada por 5.2.25:

$$\Delta t \leq \Delta t_{crit} = \frac{h}{|u|} \quad (5.2.25)$$

El empleo de intervalos temporales inferiores a Δt_{crit} puede llevar en algunos casos obtener soluciones oscilatorias, si las condiciones de contorno son tales que hacen que aparezcan capas límites [112].

5.3. Correspondencia entre el método de Galerkin sobre líneas características y el método *SUPG*

Analizando la respuesta estacionaria de la ecuación 5.2.24, escrita en 5.3.26,

$$- \left([K] + [C]^n + \frac{\Delta t}{2} [C_s]^n \right) \phi_m^n + [f]^n + \Delta t [f_s]^n + \frac{T.C}{\Delta t} \quad (5.3.26)$$

se observa que al hacer:

$$\frac{1}{2} \alpha u h = \frac{u^2 \Delta t}{2} \quad (5.3.27)$$

o lo que es equivalente:

$$\Delta t = \frac{\alpha h}{|u|} \quad (5.3.28)$$

la matriz estabilizadora $[K_s]$ introduce en el sistema la cantidad optima de difusión artificial, definida en la ecuación 3.5.49. De esta forma, se puede afirmar que bajo estas condiciones, la matriz de estabilización del método Galerkin sobre líneas características coincide con la alcanzada por el método de *SUPG*, y por tanto las soluciones estacionarias logradas en ambos casos son idénticas.

Otra forma de llegar a la misma conclusión, consiste en emplear, en el método *SUPG*, una función de peso perturbada definida por medio de la expresión 5.3.29. Es necesario aclarar que, si se analiza el caso transitorio, para que el planteamiento de los dos métodos coincida, el término de la derivada temporal $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ debe ponderarse con la función convencional Bubnov-Galerkin N_l y no con la función de peso perturbada 5.3.29.

$$\bar{W} = N_l + \frac{\Delta t}{2} u \frac{\partial N_l}{\partial x} \quad (5.3.29)$$

5.4. Planteamiento bidimensional del método Galerkin sobre líneas características

Un planteamiento equivalente al presentado en la primera parte de este capítulo, puede ser desarrollado para la ecuación bidimensional de Difusión-Advección. Así entonces para un

problema bidimensional la ecuación matricial para un elemento del dominio estará definida por:

$$[M](\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) = -\Delta t \left([K^*] + [C^*] + \frac{\Delta t}{2} [C_u] \right) + \Delta t [f]^n + \frac{\Delta t^2}{2} [f_u]^n \quad (5.4.30)$$

donde:

$$[K^*] = \int_{\Omega^e} k \left(\frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) d\Omega^e \quad (5.4.31)$$

$$[C^*] = \int_{\Omega^e} N_l \left(u_x \frac{\partial N_m}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) d\Omega^e \quad (5.4.32)$$

$$[C_u] = \frac{1}{2} \int_{\Omega^e} \left(u_x^2 \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial N_m}{\partial x} + u_x u_y \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial N_m}{\partial y} + u_x u_y \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial x} + u_y^2 \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) d\Omega^e \quad (5.4.33)$$

$$[f_u] = \frac{1}{2} \int_{\Omega^e} F \left(u_x \frac{\partial N_l}{\partial x} + u_y \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) d\Omega^e \quad (5.4.34)$$

Para este caso la condición de estabilidad del método esta dada por 5.4.35 [112]:

$$\Delta t_{crit} = \frac{\Delta t_\sigma \Delta t_\nu}{\Delta t_\sigma + \Delta t_\nu} \quad (5.4.35)$$

en donde:

$$\Delta t_\sigma = \frac{h}{|u|} \quad (5.4.36)$$

$$\Delta t_\nu = \frac{h^2}{2k} \quad (5.4.37)$$

5.5. Ejemplos de aplicación del método Galerkin sobre líneas características y comparación con el método *SUPG*

5.5.1. Caso de estudio 1: Movimiento convectivo de una función gaussiana

Este ejemplo, desarrollado entre otros autores por Wang [99], esta definido por la ecuación diferencial 5.5.38, para un dominio $\Omega(-0,5, 0,5) \times (-0,5, 0,5)$.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - k \Delta \phi + \vec{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (5.5.38)$$

con $k = 0,0001$ y un campo de velocidad rotacional $\vec{u} = [-4y, 4x]$. Las condiciones de borde definidas para las cuatro fronteras del problema, son condiciones de Dirichlet

homogéneas, en tanto que las condiciones iniciales están definidas por la expresión 5.5.39, con $\sigma = 0,0477$. La solución analítica del problema se plantea en la expresión 5.5.40.

$$\phi(x, y, 0) = e^{-\frac{(x+0,25)^2+y^2}{2\sigma^2}} \quad (5.5.39)$$

$$\phi(x, y, t) = \frac{2\sigma^2}{2\sigma^2 + 4kt} e^{-\lambda} \quad (5.5.40)$$

en esta última expresión:

$$\lambda = \frac{(\bar{x} + 0,25)^2 + \bar{y}^2}{2\sigma^2 + 4kt} \quad (5.5.41)$$

$$\bar{x} = x \cos 4t + y \sin 4t \quad (5.5.42)$$

$$\bar{y} = x \sin 4t + y \cos 4t \quad (5.5.43)$$

Este problema se caracteriza por tener dentro del dominio espacial tanto zonas de convección dominante, ubicadas cerca de los bordes del problema, como zonas de difusión dominante, ubicadas en la región cercana al centro del dominio. Estas zonas están definidas espacialmente y no cambian en el tiempo, dado que el coeficiente de difusión y el campo de velocidades no son función de esta variable. Por lo anterior, este caso resulta especialmente interesante para evaluar la capacidad de las técnicas numéricas para aproximar problemas con condiciones advectivas variables sobre todo el dominio. Los resultados obtenidos en este ejemplo se muestran en las Figuras 5.3, 5.4, 5.5 y 5.6, considerando tanto la formulación con el método de Galerkin sobre líneas características, como con el método SUPG. En ambos planteamientos se empleó una discretización temporal con pasos de tiempo $\Delta t = 0,0005$ y un tiempo final $t_f = 0,5$.

Para la primera malla, formada por 10000 elementos ($h = 0,01$, Figura 5.3), se obtiene un número máximo de Peclet igual a 141, ubicado en los vértices del dominio, el cual decrece a medida que se está más cerca del centro del cuadrado, alcanzando un valor mínimo de cero en este punto. Se observa, en la Figura 5.3, que las soluciones obtenidas por los dos métodos son similares en cuanto a magnitud y desplazamiento de la función gaussiana. Ambas aproximaciones no muestran oscilaciones, aunque la aproximación alcanzada con el método de Galerkin sobre líneas características incorpora una cantidad de difusión numérica inferior a la introducida por el método SUPG. Esta diferencia en las difusiones artificiales se observa en los valores máximos de ϕ alcanzados al terminar la simulación ($\phi_{max} = 0,95$ para el método de Galerkin sobre líneas características y $\phi_{max} = 0,89$ para el método SUPG), y permite intuir que, al aumentar el tamaño de la malla, el método de líneas características va a alcanzar soluciones inestables antes que el SUPG. Efectivamente al aumentar el tamaño del elemento hasta $h = 0,05$, se comienzan a observar pequeñas oscilaciones en la aproximación realizada con líneas características, mientras la solución alcanzada con

SUPG aún se muestra estable, tal como se observa en la Figura 5.4. Al elevar el tamaño del elemento hasta $h = 0,1$, las oscilaciones sobre la aproximación con líneas características aumentan considerablemente, alcanzándose ahora valores negativos de ϕ . Para este mismo caso la aproximación con *SUPG* se observa libre de inestabilidades numéricas. Para las tres mallas mostradas, los valores de ϕ_{max} al tiempo $t = t_f$ que se alcanzan con el método de las líneas características son siempre mayores que los obtenidos con el método *SUPG*, esto sigue guardando relación con los niveles de difusión numérica incorporados por cada método y con la capacidad de estabilizar aproximaciones a problemas altamente convectivos.

La Figura 5.6 muestra una gráfica de convergencia del error en la norma de energía (norma en L_2) en función del tamaño del elemento. De acuerdo con esta gráfica, para mallas finas, es decir bajos números de Peclet, los dos métodos se comportan de forma similar, las magnitudes de los errores son bajas y coinciden con los errores alcanzados bajo el método Bubnov-Galerkin. Al aumentar el tamaño de la malla, el error alcanzado con el método *SUPG* aumenta casi linealmente y se estabiliza, mientras que el error para el método de líneas características crece rápidamente. Adicionalmente se puede ver como, para todo el rango de mallas analizado, las gráficas de error del método de líneas características es solo ligeramente menor a la obtenida con el método Galerkin convencional, diferencia que crece con el tamaño de malla.

5.5.2. Caso de estudio 2: Movimiento convectivo de un frente de onda

Este ejemplo, desarrollado en [12], modela la propagación de un frente de onda dentro de un dominio cuadrado $\Omega(0, 1) \times (0, 1)$. El problema esta definido por medio de la ecuación 5.5.38, para una constante $k = 0,01$ y un campo de velocidad definido por el vector $\vec{u} = [w(x, t), w(y, t)]$, en donde:

$$w(r, t) = \frac{0,1A + 0,5B + C}{A + B + C} \quad (5.5.44)$$

$$A(n, t) = e^{-\frac{0,05[n-0,5+4,95(t+0,3)]}{k}} \quad (5.5.45)$$

$$B(n, t) = e^{-\frac{0,25[n-0,5+0,75(t+0,3)]}{k}} \quad (5.5.46)$$

$$C(n, t) = e^{-\frac{0,5(n-0,375)}{k}} \quad (5.5.47)$$

Las condiciones de borde definidas para este ejemplo son condiciones de Neumann homogéneas, en tanto que las condiciones iniciales están dadas por la ecuación 5.5.48:

$$\phi(x, y, 0) = w(x, 0)w(y, 0) \quad (5.5.48)$$

El ejemplo resulta adecuado para la evaluación de los métodos aquí considerados, dado que el campo de velocidades asociado al término advectivo es variable en el tiempo y en

el espacio, lo cual forma una zona predominantemente advectiva que crece, a la vez que se reduce la zona de difusión dominante, tal como se muestra en la Figura 5.7. Esta condición exige de la técnica numérica empleada una mayor capacidad de estabilización tanto en la dimensión espacial, como en la temporal.

Los resultados obtenidos en este ejemplo para diferentes mallas, se muestran en las Figuras 5.8, 5.9, 5.10 considerando tanto la formulación con el método de Galerkin sobre líneas características, como el método *SUPG*. En ambos planteamientos se empleó una discretización temporal con pasos de tiempo $\Delta t = 0,0005$ y un tiempo final $t_f = 0,5$.

Se observa como con la malla más fina, formada por 10000 elementos ($h = 0,01$, Figura 5.8), no hay diferencias significativas en las aproximaciones alcanzadas por las dos técnicas (líneas características y *SUPG*). Ambas técnicas logran aproximaciones estables y exactas, aún en la zona de advección dominante, en la cual se alcanza un valor en el número de Peclet igual a 0.75 ($P_e < 1$). Para la segunda malla mostrada, construida con 289 elementos ($h = 0,05$, Figura 5.9), el número P_e en la zona de advección dominante se eleva a 4.5 y aún no son evidentes inestabilidades numéricas en ninguna de las dos aproximaciones. Para la tercer malla empleada ($h = 0,1$, Figura 5.10), la aproximación lograda con el método de líneas características comienza a mostrar la presencia de oscilaciones en la zona predominantemente advectiva, la cual tiene un número $P_e = 7,5$.

En cuanto a la gráfica de convergencia del error en norma L_2 , mostrada en la Figura 5.11, se observa que en este caso los errores alcanzados con los tres métodos tienen magnitudes muy inferiores a los mostrados en el caso anterior. Se aprecia también como la línea de convergencia obtenida con el método de Galerkin sobre líneas características es muy similar a la obtenida con el método Galerkin convencional. No obstante, a diferencia del caso anterior, el valor del error obtenido con el método de líneas características es, en cada paso de tiempo, inferior al valor obtenido con *SUPG*.

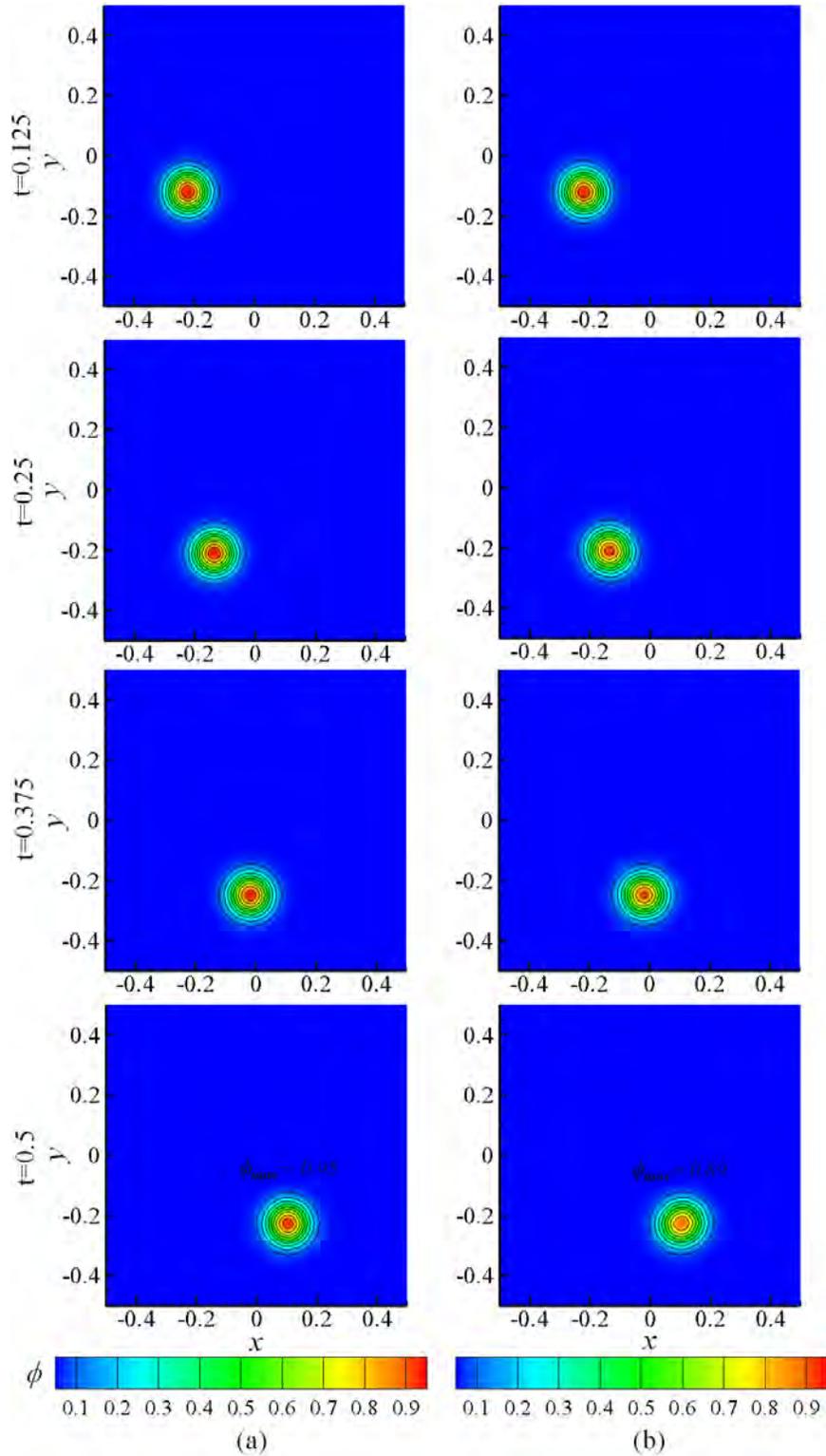


Figura 5.3: Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 1 empleando $h = 0,01$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de *SUPG* (b).

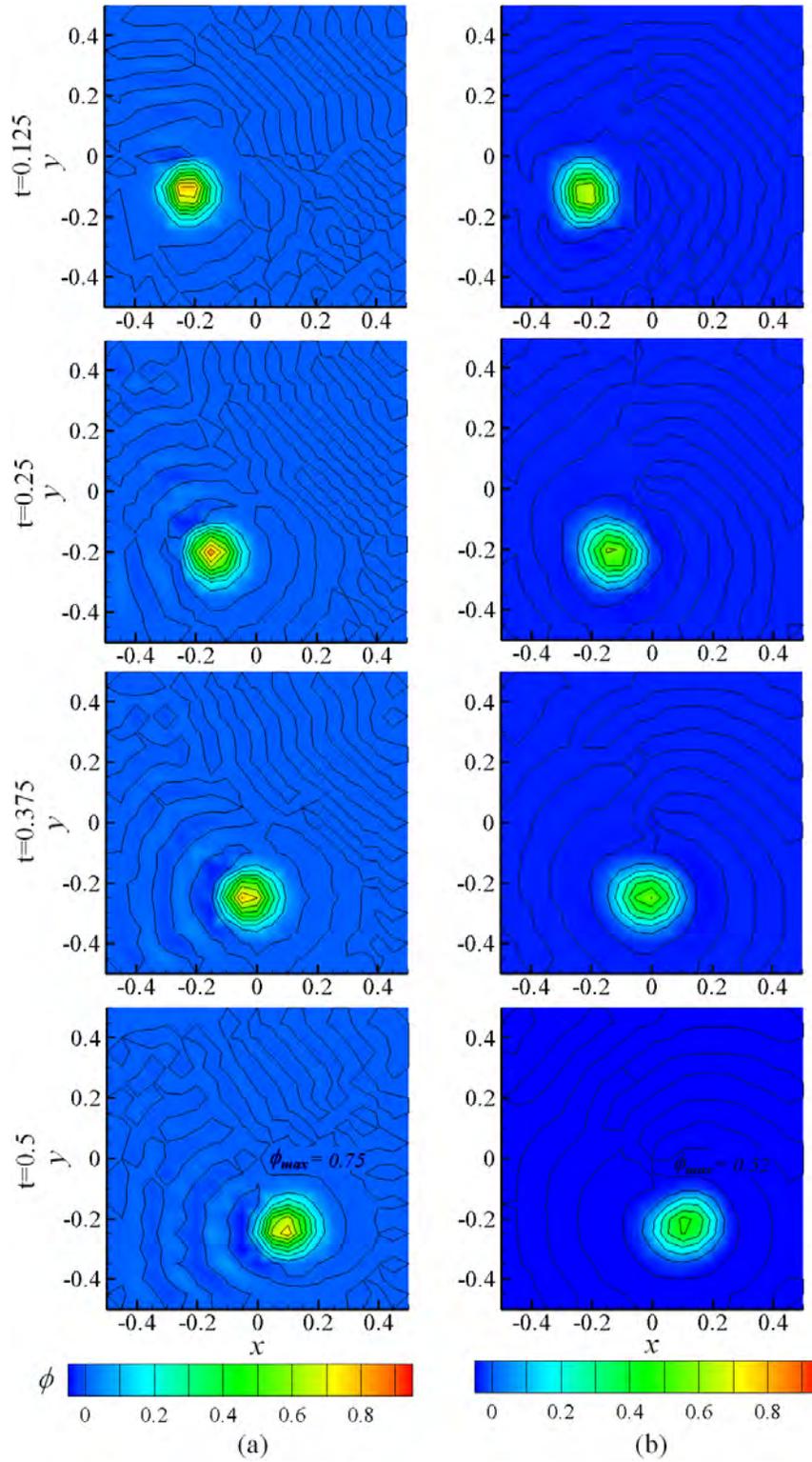


Figura 5.4: Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 1 empleando $h = 0,05$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de *SUPG* (b).

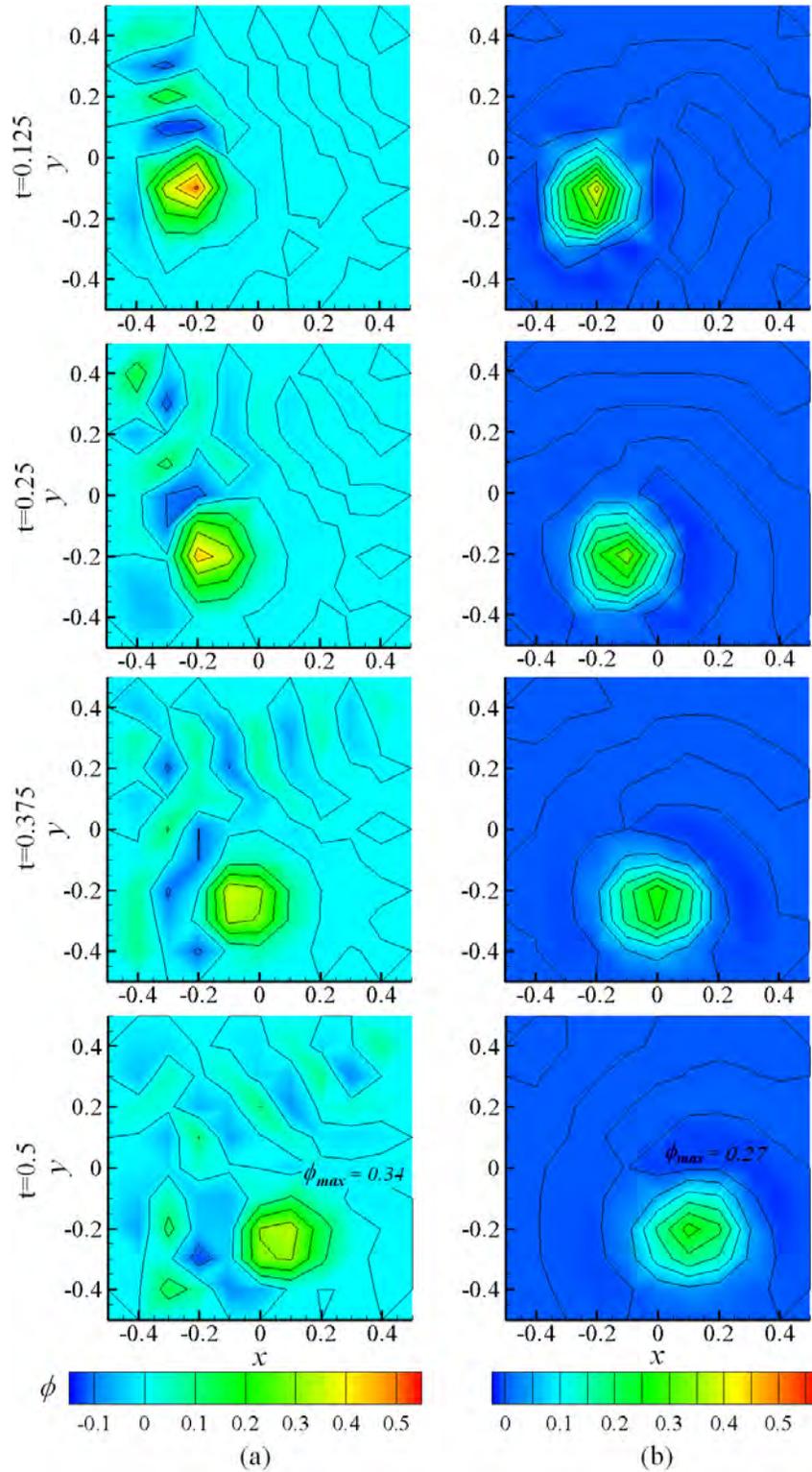


Figura 5.5: Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 1 empleando $h = 0,1$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de *SUPG* (b).

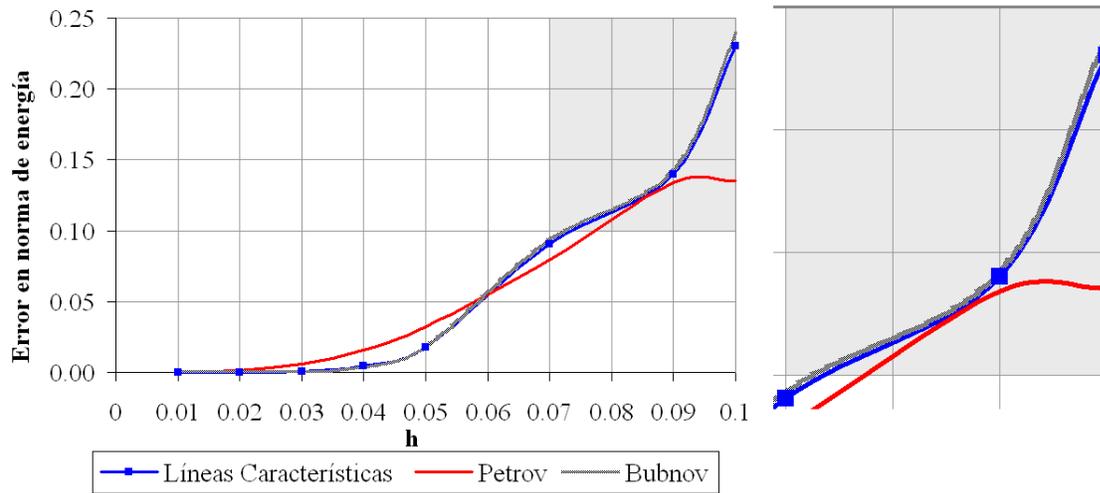


Figura 5.6: Gráfica de convergencia del error en norma de energía para las soluciones alcanzadas en el caso 1.

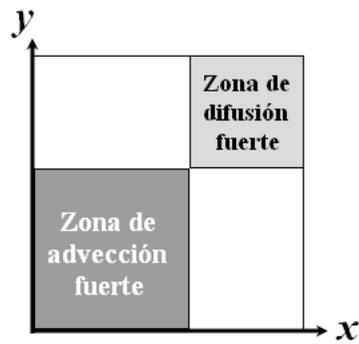


Figura 5.7: Distribución de las zonas de alta advección y difusión para el caso 2.

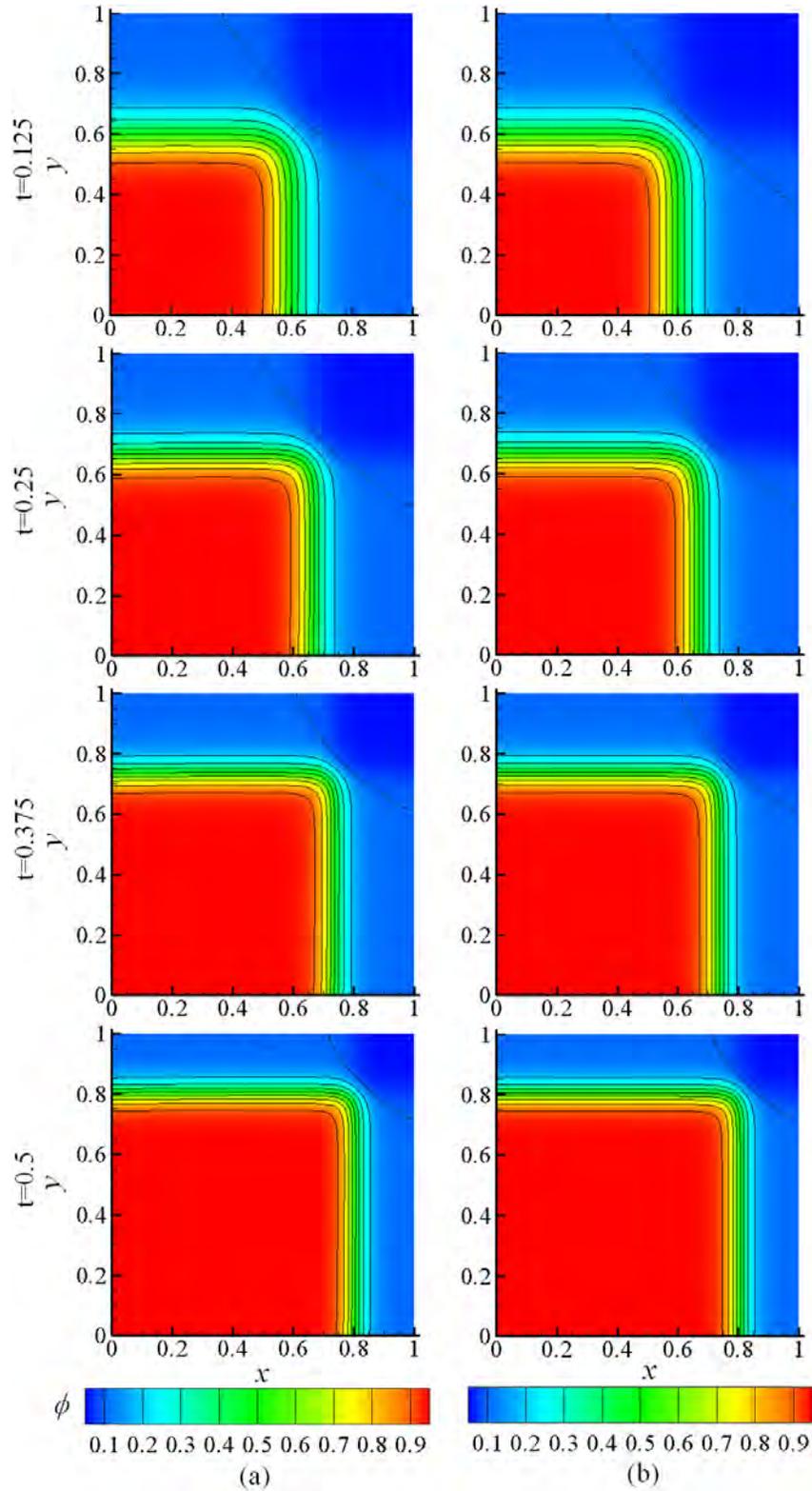


Figura 5.8: Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 2 empleando $h = 0,01$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).

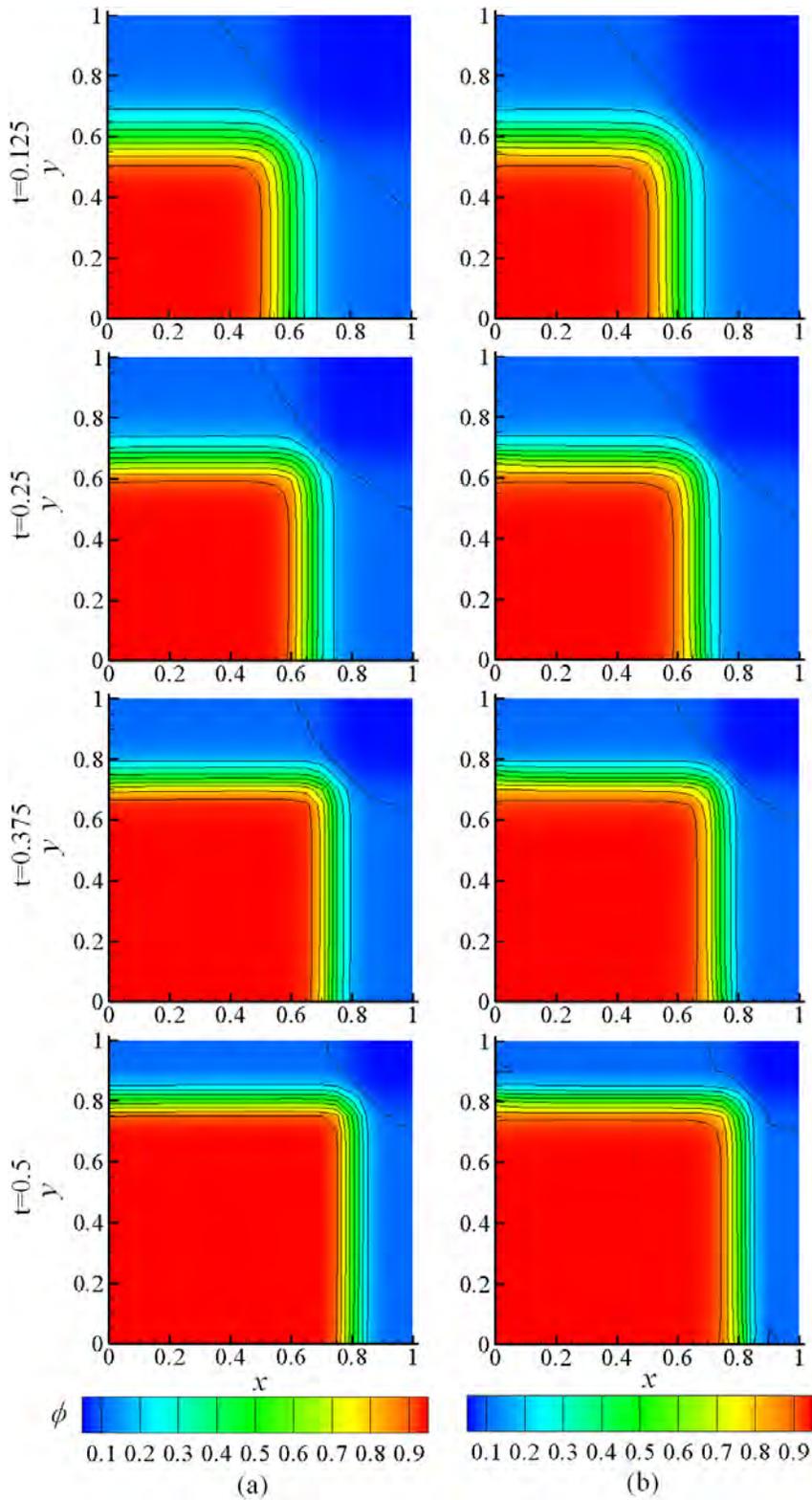


Figura 5.9: Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 2 empleando $h = 0,05$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).

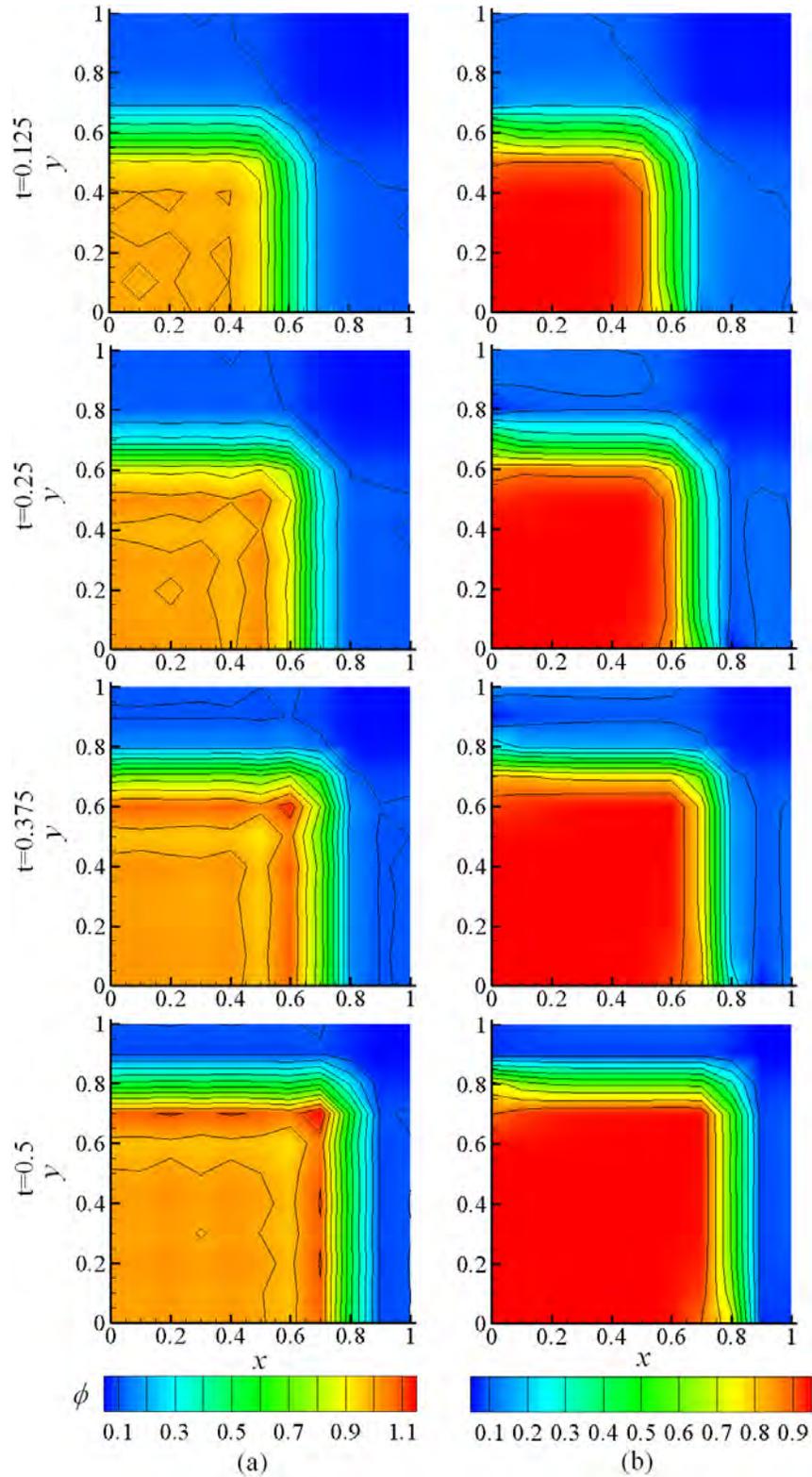


Figura 5.10: Soluciones transitorias obtenidas para el caso de estudio 2 empleando $h = 0,1$, el método de Galerkin sobre líneas características (a) y el método de SUPG (b).

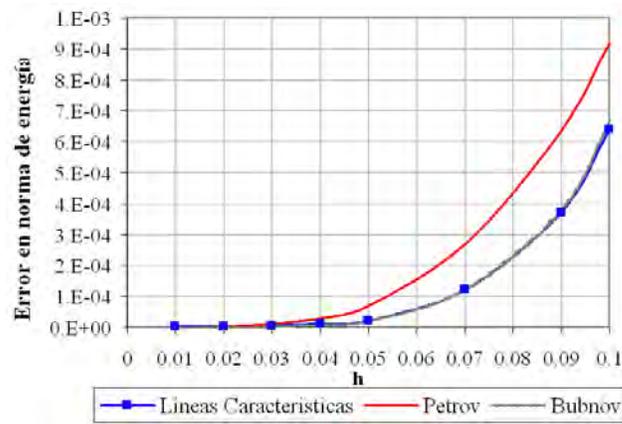


Figura 5.11: Gráfica de convergencia del error en norma de energía para las soluciones alcanzadas en el caso 2.

Aplicación del método *SUPG* en el modelado numérico del problema de dispersión de sustancias en cuerpos de agua

Los dos capítulos precedentes se dedicaron a formular algoritmos para la solución de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción aplicando el método Petrov-Galerkin en contracorriente (*SUPG*), así como también a través del método de Galerkin sobre líneas características. Las pruebas numéricas desarrolladas mostraron que ambos métodos son bastante exactos, aunque difieren considerablemente en la capacidad de estabilización de la solución. Las aproximaciones numéricas desarrolladas mostraron que el método *SUPG* permite encontrar respuestas estables aún para números de Peclet considerablemente altos, casos en los que el método de las líneas características no logra eliminar satisfactoriamente las oscilaciones de la solución. Por lo anterior, el Petrov-Galerkin fue seleccionado como técnica de solución numérica del problema de dispersión de contaminantes en cuerpos de agua, el cual se presenta en este capítulo.

6.1. Modelado de la dispersión de contaminantes en ríos

En la primera parte de este documento se describieron algunos de los fenómenos físico-químicos que hacen parte de la dispersión de manchas de contaminantes en cuerpos de agua. Se considerará ahora de forma más detallada el modelo para dispersión de contaminantes solubles y boyantes en el agua.

El problema de la mezcla de sustancia en ríos, es comúnmente tratada a través de modelos bidimensionales, los cuales tienen origen en la ecuación de conservación de masa, simplificada a dos dimensiones suponiendo que la sustancia se encuentra uniformemente mezclada en la dirección vertical. Esto implica que la función de densidad másica trabajada

dentro de la ecuación diferencial, se referirá a una concentración ponderada puntualmente a lo largo de toda la profundidad del río [59; 26].

Así, partiendo de la ecuación general de conservación de masa 6.1.1:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = 0 \quad (6.1.1)$$

donde C es la densidad másica o concentración de la sustancia disuelta y \vec{q} es el vector de densidad de flujo másico. En un cualquier punto lejano de la zona de descarga, la sustancia contaminante se moverá entonces desde una zona de alta concentración a una de menor concentración. Este transporte de la sustancia se puede producir por tres tipos de fenómenos: la difusión molecular, la difusión turbulenta y la advección. Los términos de flujo másico debido a estos tres fenómenos se describen en 6.1.2, 6.1.3 y 6.1.4 [26]:

$$\vec{q}_m = -K_m \nabla \bar{C} \quad (6.1.2)$$

$$\vec{q}_t = -K_t \nabla \bar{C} \quad (6.1.3)$$

$$\vec{q}_a = \vec{u} \bar{C} \quad (6.1.4)$$

donde: \vec{q}_m , \vec{q}_t y \vec{q}_a son los vectores de densidad de flujo másico, asociados a difusión molecular, difusión turbulenta y advección, respectivamente. K_m es el coeficiente de difusión molecular de la sustancia en el agua, K_t es el coeficiente de difusión turbulenta y u es la velocidad en el punto. En estas mismas ecuaciones la barra superior indica valores medios en el punto.

Integrando la ecuación de conservación de masa en cada punto a lo largo de la dirección z , desde la superficie hasta el fondo del río, se encuentra:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \bar{C} dz + \nabla \cdot \int_0^h \vec{q} dz = 0 \quad (6.1.5)$$

considerando las componentes del flujo másico \vec{q} , la ecuación 6.1.5 se convierte en 6.1.6:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \bar{C} dz + \nabla \cdot \int_0^h (\vec{q}_m + \vec{q}_t + \vec{q}_a) dz = 0 \quad (6.1.6)$$

Analizando cada uno de los términos de esta ecuación de tiene:

$$\bar{\bar{C}} \cdot h = \int_0^h \bar{C} dz \quad (6.1.7)$$

$$\int_0^h \vec{q}_m dz = \bar{\bar{q}}_m \cdot h = -K_m \cdot h \cdot \nabla \bar{\bar{C}} \quad (6.1.8)$$

$$\int_0^h \bar{q}_t dz = \bar{q}_t \cdot h = -K_t \cdot h \cdot \nabla \bar{C} \quad (6.1.9)$$

$$\int_0^h \bar{q}_a dz = \bar{q}_a \cdot h = \overline{u \cdot C} \cdot h \quad (6.1.10)$$

La expresión 6.1.10 puede ser escrita también de la forma:

$$\overline{u \cdot C} \cdot h = \left(\overline{u \bar{C}} + \overline{u^y \cdot C^y} \right) \cdot h \quad (6.1.11)$$

en donde:

$$\overline{u^y \cdot C^y} \cdot h = \int_0^h u^y \cdot C^y dz \quad (6.1.12)$$

$$u^y = \bar{u}(x, y, z) - \bar{\bar{u}}(x, z) \quad (6.1.13)$$

$$C^y = \bar{C}(x, y, z) - \bar{\bar{C}}(x, z) \quad (6.1.14)$$

Incorporando los resultados 6.1.7 a 6.1.14, la expresión 6.1.6 se convierte en:

$$\frac{\partial \bar{\bar{C}} \cdot h}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{u \bar{C}} + \overline{u^y \cdot C^y} + \bar{q}_t + \bar{q}_m \right) \cdot h = 0 \quad (6.1.15)$$

Considerando que \bar{q}_d se denomina la densidad de flujo por dispersión y define de acuerdo con 6.1.16, entonces la ecuación de conservación de masa ahora se puede escribir como se muestra en 6.1.17.

$$\bar{q}_d = \overline{u^y \cdot C^y} + \bar{q}_t + \bar{q}_m \quad (6.1.16)$$

$$\frac{\partial \bar{\bar{C}} \cdot h}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{u \bar{C}} \cdot h + \bar{q}_d \cdot h \right) = 0 \quad (6.1.17)$$

Como ya se mencionó en la primera parte de este documento, el termino de dispersión puede modelarse análogamente a la difusión [59; 26]. De modo que, de acuerdo a la primera Ley de Fick, la ecuación de conservación de masa bidimensional, ponderada con la profundidad, se puede escribir así:

$$\frac{\partial \bar{\bar{C}} \cdot h}{\partial t} + \bar{u} \nabla \cdot (\bar{C} \cdot h) - \nabla \cdot (E \nabla \bar{C} \cdot h) = 0 \quad (6.1.18)$$

donde E es la matriz de coeficientes de dispersión, la cual es definida como:

$$E = \begin{bmatrix} E_{xx} & E_{xy} \\ E_{yx} & E_{yy} \end{bmatrix} \quad (6.1.19)$$

Dado que la corriente de los ríos cambia constantemente de dirección, resulta más práctico expresar la matriz de dispersión en términos de un coeficiente de dispersión longitudinal E_L , el cual define la dispersión en la dirección de la corriente, y un coeficiente de dispersión transversal o lateral E_T , el cual define la dispersión en la dirección perpendicular a las líneas de corriente. Los términos de la matriz E se expresarán, de acuerdo con E_L y E_T , de la siguiente forma [59; 1]:

$$E_{xx} = E_L \frac{u_x^2}{|u|^2} + E_T \frac{u_y^2}{|u|^2} \quad (6.1.20)$$

$$E_{yy} = E_T \frac{u_x^2}{|u|^2} + E_L \frac{u_y^2}{|u|^2} \quad (6.1.21)$$

$$E_{xy} = E_{yx} = (E_L - E_T) \frac{u_x u_y}{|u|^2} \quad (6.1.22)$$

A la expresión 6.1.18 se le pueden adicionar algunos términos reactivos de primer orden, como en la ecuación 6.1.23:

$$\frac{\partial \bar{C}.h}{\partial t} + \bar{u} \nabla \cdot (\bar{C}.h) - \nabla \cdot (E \nabla \bar{C}.h) + \lambda.h.\bar{C} = 0 \quad (6.1.23)$$

en donde λ define los coeficientes reactivos de primer orden. Dentro de los términos reactivos de primer orden, el más importante es el término evaporativo [96], para el cual han sido planteados muchos modelos de cálculo. Normalmente el coeficiente λ de evaporación es calculado empleando la teoría de volatilización de dos capas [102; 96], de acuerdo a la cual:

$$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{1}{\lambda_l} + \frac{1}{H.\lambda_g} \right).h \quad (6.1.24)$$

donde H es la constante de la Ley de Henry, en tanto que λ_l y λ_g son las velocidades de transferencia de masa en cada capa (líquida y gaseosa). Estas velocidades pueden ser calculadas, para la dispersión de sustancias en ríos, por medio de las ecuaciones de regresión 6.1.25 y 6.1.26 [88].

$$\lambda_l = 0,2351u^{0,969}h^{-0,673} \sqrt{\frac{32}{M}} \quad [m/h] \quad (6.1.25)$$

$$\lambda_g = 11,37(u + \nu) \sqrt{\frac{18}{M}} \quad [m/h] \quad (6.1.26)$$

En las expresiones 6.1.25 y 6.1.26, M es la masa molar de la sustancia disuelta y ν es la velocidad del viento.

6.2. Modelado de la dispersión de contaminantes en un tramo del río Magdalena

Aunque el transporte de mercancías y suministros industriales no es una actividad extensiva a lo largo de todo el río, como tampoco intensiva en los tramos navegables, el derrame de sustancias contaminantes en el cauce del río son relativamente frecuentes. Resulta claro que en la medida en que el río es empleado para el transporte de suministros para la industria, los riesgos de derrames de sustancias tóxicas aumentan, aún más si las reglamentaciones de seguridad y controles para el movimiento de estas sustancias no se aplican. Un ejemplo de este problema se hace evidente en la zona del sur del departamento de Bolívar, en donde la activa explotación aurífera demanda el suministro de diferentes sustancias químicas (especialmente de cianuro), cuyo transporte se realiza por el río Magdalena. Este transporte de insumos, bajo condiciones no controladas, ha generado dos accidentes, que hubieran podido generar el vertimiento de cianuro sobre el río Magdalena, perjudicando más de cincuenta municipios ribereños de los departamentos de Cesar, Bolívar, Atlántico y Magdalena.

El primer incidente sucedió en Abril de 2006, cuando cinco canecas con 50 kilogramos de cianuro granulado cada una, cayeron al río Inanea (río tributario del río Magdalena), en jurisdicción del municipio de Santa Rosa del sur, departamento de Bolívar. En este incidente solo una de las cinco canecas se rompió y derramo contaminante al cauce del río, causando alerta y suspensión del servicio de agua y de la actividad pesquera en numerosos municipios.

Un segundo incidente se presentó en Agosto de 2008, cuando 96 canecas con 50 kilogramos de cianuro granulado cada una, cayeron al río Magdalena, a la altura del municipio Bodega Central, departamento de Bolívar. En este mismo accidente, provocado por el volcamiento del ferry que movilizaba la sustancia, se vertieron adicionalmente 1300 litros de herbicida y 1500 kilos de sulfato de zinc al río. En este indecente se lograron recuperar 94 de las 96 canecas de cianuro perdidas y no se registró ningún nivel de contaminación de cianuro en las aguas del río.

Lo anterior motiva el desarrollo de algoritmos para la simulación de la dispersión de manchas de contaminantes en el río Magdalena, los cuales permitan predecir el comportamiento de estos vertimientos y ayudar a planear las acciones de contingencia para reducir los impactos del contaminante, tanto sobre las poblaciones ribereñas, como en el ecosistema.

El modelo desarrollado se fundamenta en la ecuación de conservación de masa 6.1.23 y en las expresiones de evaporación 6.1.24-6.1.26. De acuerdo con las pruebas realizadas, en las secciones anteriores, a las dos técnicas de estabilización estudiadas (*SUPG* y el método de Galerkin sobre líneas características), se utilizó el método Petrov-Galerkin en contracorriente (*SUPG*) para la solución numérica por elementos finitos de dicha ecuación diferencial.

Conociendo la importancia de validar el algoritmo desarrollado, se seleccionó como domi-

nio de prueba, el modelo físico del río Magdalena ubicado en el Laboratorio de Hidráulica de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Colombia. Dicho modelo físico reproduce, a una escala 1:300, el tramo del río Magdalena ubicado a la altura del municipio Calamar, en los límites de los Departamentos de Bolívar, Atlántico y Magdalena. En la Figura 6.1 se muestra la ubicación del tramo del río empleado para la construcción del modelo físico, en tanto que en las Figuras 6.2-6.4 se muestran algunas tomas del modelo físico en cuestión.



Figura 6.1: Ubicación geográfica del tramo del río Magdalena analizado.

6.2.1. Modelo hidrodinámico y campo de velocidades

Como parte de las variables de entrada al modelo de dispersión, se hace necesario conocer el campo de hidrodinámico de velocidades del modelo a escala del tramo de río analizado. Estas velocidades fueron calculadas a partir de la solución numérica de las ecuaciones bidimensionales de Navier-Stokes, para flujo incompresible y en estado transitorio. La solución numérica, programada en lenguaje FORTRAN y desarrollada por el grupo de métodos modelado y métodos numéricos (*GNUM*) de la Universidad Nacional de Colombia, emplea una formulación con elementos cuadrangulares de nueve nodos para el cálculo de las velocidades y de cuatro nodos para la estimación de las presiones. Esta formulación mixta permite cumplir la condición de incompresibilidad y evita el requerimiento de técnicas de estabilización. La malla empleada para la aproximación del campo de velocidades consistió de 9947 elementos cuadrangulares (elementos con tamaño medio igual a $0,1m$) y 41083 nodos. La Figura 6.5 muestra los contornos del dominio del problema, así como también la malla empleada para el análisis hidrodinámico.



Figura 6.2: Toma del modelo físico del tramo del río Magdalena simulado (1).

Las condiciones de borde empleadas para fronteras sólidas fueron condiciones de velocidad nula, en tanto que para la frontera de entrada (contorno 4), se definió una velocidad igual a 4cm/s . El campo de velocidades obtenido en estado estable, dadas las condiciones descritas anteriormente, se ilustra en la Figura 6.6.

6.2.2. Modelo de dispersión

Conocido el campo de velocidades del modelo físico analizado, es posible plantear una solución para el problema de dispersión de una sustancia. Como ya se mencionó el modelo de dispersión bidimensional empleado, se fundamentó en la ecuación de conservación de masa 6.1.23, en tanto que las condiciones de borde empleadas fueron condiciones de Neuman homogéneas para todos los bordes sólidos (contornos 1, 3, 5 y 6 en la Figura 6.5). La condición inicial simuló un derrame de una sustancia a lo largo de todo el borde de entrada de flujo (contorno 4 en la Figura 6.5), definiéndose un valor de concentración de la sustancia vertida igual a 110ppt (110g/lt), para todos los nodos ubicados sobre este contorno.

La discretización empleada coincidió con la utilizada para el análisis hidrodinámico anterior, notando que para este problema se emplearon elementos cuadrangulares de cuatro nodos. De esta forma, para este análisis la malla se formó con 9947 elementos y 10594 nodos.

Dado que la ecuación de conservación de masa 6.1.23, considera profundidad del río variable, resultó necesario para este análisis la determinación de los valores nodales de profundidad. Esto se realizó, partiendo de los datos digitalizados de profundidad del modelo físico (proporcionados por el laboratorio de Hidráulica de la Universidad Nacional de Colombia) y empleando un simple algoritmo de interpolación para cada una de las posiciones nodales



Figura 6.3: Toma del modelo físico del tramo del río Magdalena simulado (2).

definidas en la malla. La Figura 6.7 muestra el campo de profundidades nodales resultante de este pre-proceso.

La solución temporal se realizó de acuerdo a un esquema *Backward-Euler* utilizando incrementos temporales iguales a $10s$ y un tiempo final de simulación de $1000s$.

Las Figuras 6.8 y 6.9 muestran la dispersión de la sustancia vertida, en términos de la concentración de la misma en diferentes puntos del río, para diferentes instantes de tiempo y considerando coeficientes de dispersión $E_L = 0,002m^2/s$ y $E_T = 0,0005m^2/s$. Los valores de estos coeficientes de dispersión se ajustaron empleando los resultados experimentales descritos a continuación.

6.2.3. Validación experimental del modelo numérico

Con el fin de validar el modelo de dispersión empleado, así como la implementación numérica por elementos finitos desarrollada, se replicaron las condiciones del modelo numérico sobre el modelo físico empleado. Este montaje permitió calibrar los coeficientes de dispersión y comparar los valores de concentración experimentales con los predichos por el modelo numérico.

El experimento consistió en el vertimiento de una solución salina, la cual fue empleada como trazador, aguas arriba en el modelo físico del río Magdalena utilizado. En cada una de las tres pruebas, se vertieron a lo ancho del canal $18lt$ de solución salina a una concentración de $110ppt$, en un punto correspondiente con el borde de entrada del fluido en el modelo



Figura 6.4: Toma del modelo físico del tramo del río Magdalena simulado (3).

numérico (contorno 4 en la Figura 6.5). Este vertido se hizo en el menor tiempo posible, pero tomando cuidado de perturbar lo menos posible la corriente propia del modelo físico.

El caudal de alimentación del canal (o modelo físico) fue regulado de tal manera que la velocidad del agua en el punto correspondiente al contorno de entrada fuera igual a 4cm/s . Esta velocidad fue establecida regulando el caudal de alimentación del canal y haciendo mediciones de velocidad en varios puntos de la línea de vertido, por medio de un sensor vectorial de velocidad (marca *SonTek*[®] referencia YSI 10-MHz ADV), el cual tiene una resolución de $0,01\text{cm/s}$.

Las mediciones de concentración se realizaron en seis (6) puntos de control previamente establecidos y los cuales se ubican en la Figura 6.10. Para la medición de la concentración se sacaron muestras de agua, del punto medio del canal, cada 20 segundos durante 15 minutos. Las muestras de agua fueron posteriormente analizadas con un sensor de salinidad (Marca *Hanna Instruments*[®] referencia HI98130), el cual tiene una resolución igual a $0,01\text{ppt}$.

La prueba se repitió dos veces y los promedios de las mediciones experimentales de concentración de sal realizadas se reportan en las Figura 6.11. Por medio de estas mediciones se logró, empleando una técnica básica de ensayo y error, calibrar los coeficientes de dispersión del modelos numérico. De esta forma, se obtuvieron los resultados numéricos mostrados en la Figura 6.11, para los coeficientes de dispersión $E_L = 0,002\text{m}^2/\text{s}$ y $E_T = 0,0005\text{m}^2/\text{s}$.

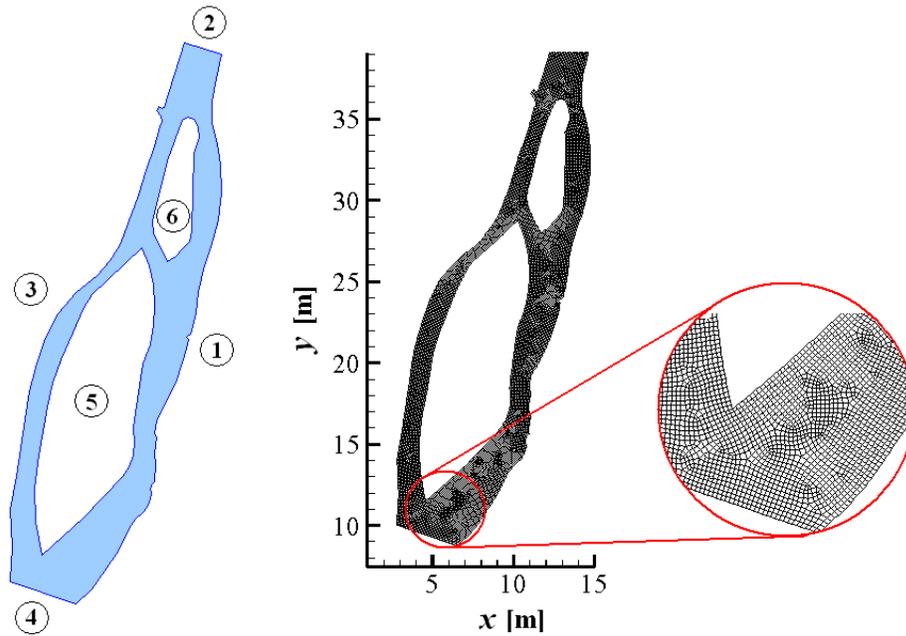


Figura 6.5: Contornos del dominio y malla empleada para la solución del problema hidrodinámico y de dispersión.

Como se observa, la correlación entre los datos numéricos y los experimentales es muy baja para los puntos más cercanos a la zona de vertido del trazador, y en especial para el punto de control número uno, en donde se puede observar una fuerte turbulencia por efecto de la energía perturbadora adicionada al fluido durante el vertido. Es de esperarse fuertes variaciones espaciales y temporales de los coeficientes de dispersión en las zonas cercanas al borde de entrada del trazador. De esta manera, el conjunto de datos numéricos y experimentales que mejor correlación presentan son los más alejados al punto de vertido, es decir en el punto de control número seis. Esta observación coincide plenamente con lo planteado por [26], según el cual la expresión de conservación de masa 6.1.23 solo permite hacer consideraciones válidas en las zonas no afectadas por la energía de descarga del contaminante en el río.

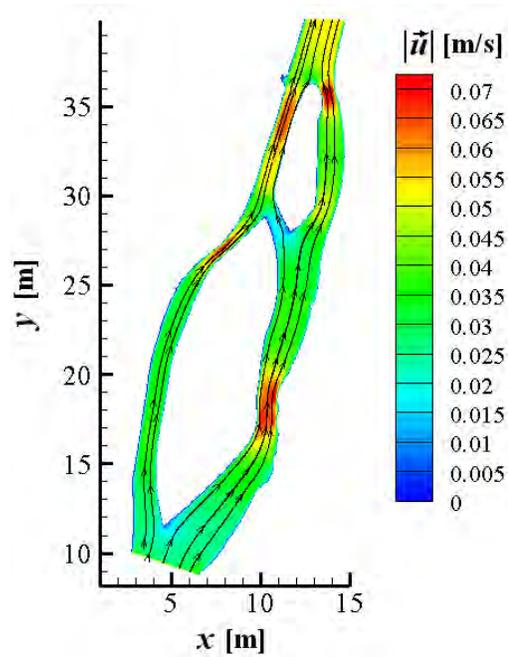


Figura 6.6: Campo de velocidades simulado para el modelo físico del tramo del río Magdalena analizado.

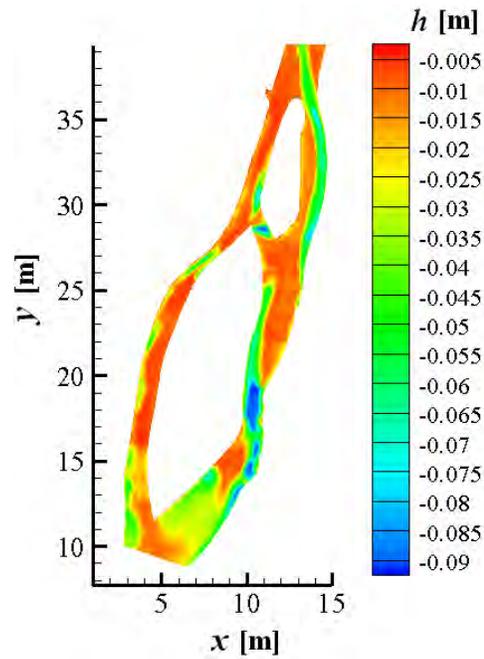
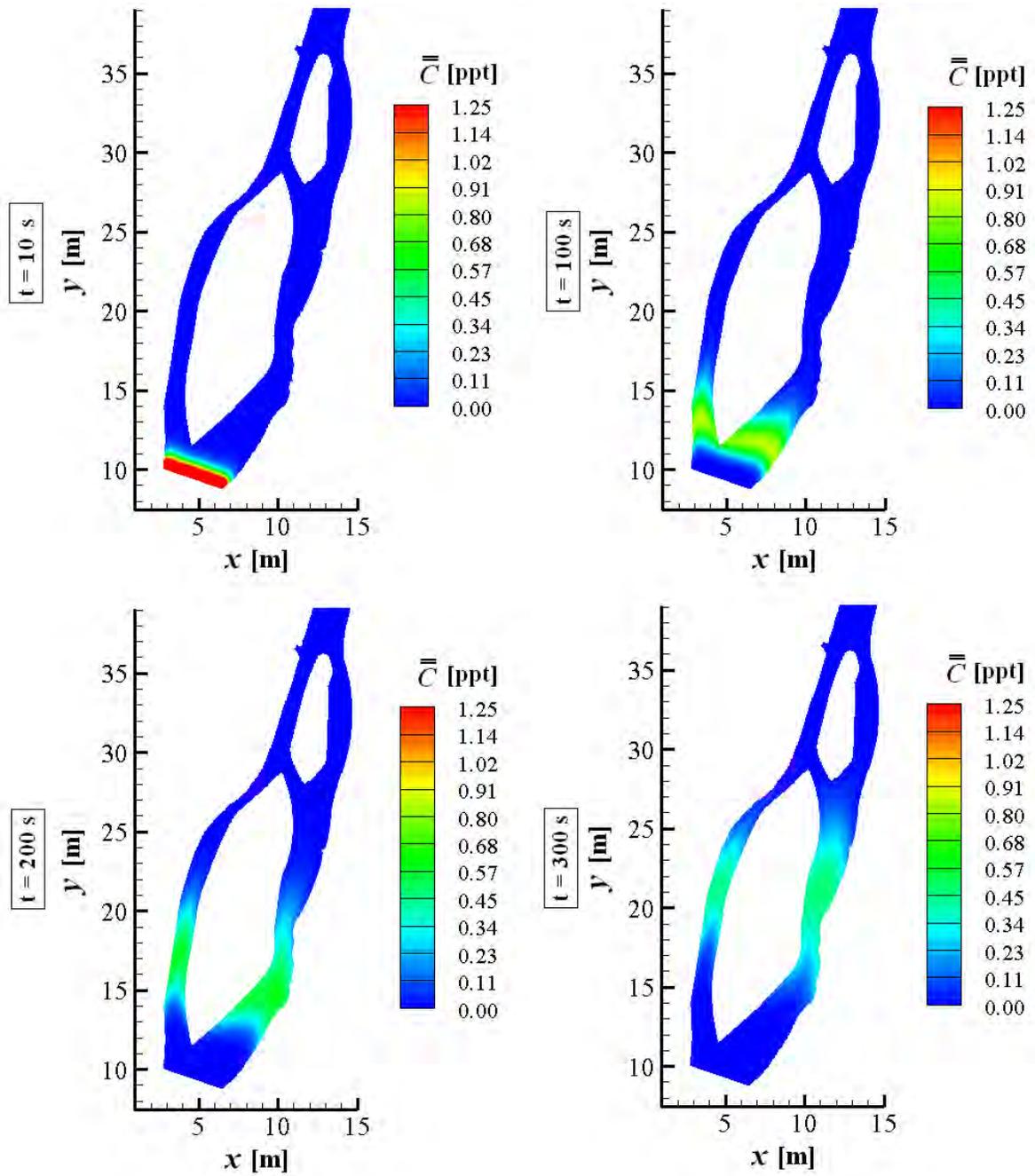


Figura 6.7: Campo escalar de profundidades del modelo físico del tramo del río Magdalena analizado.



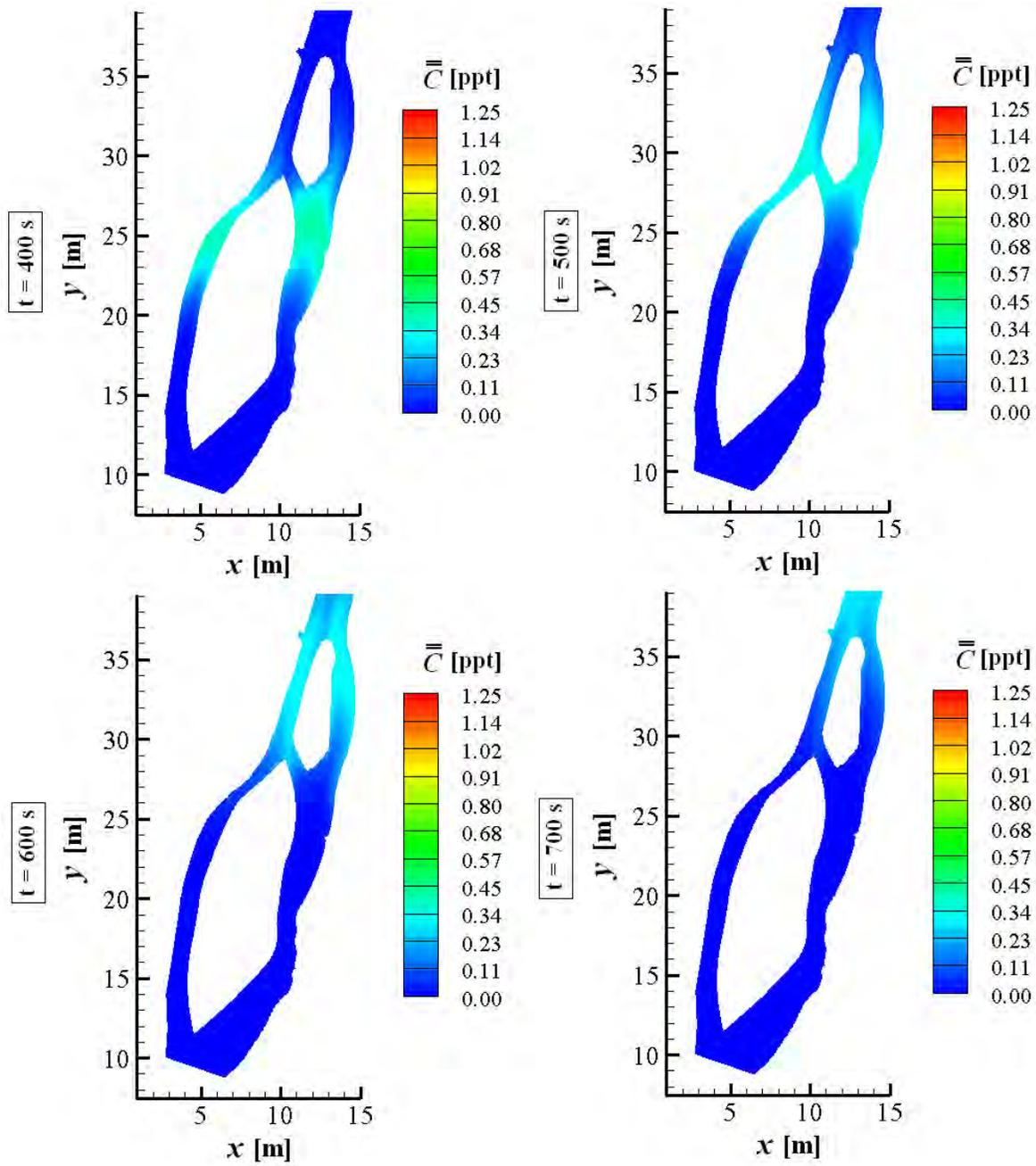
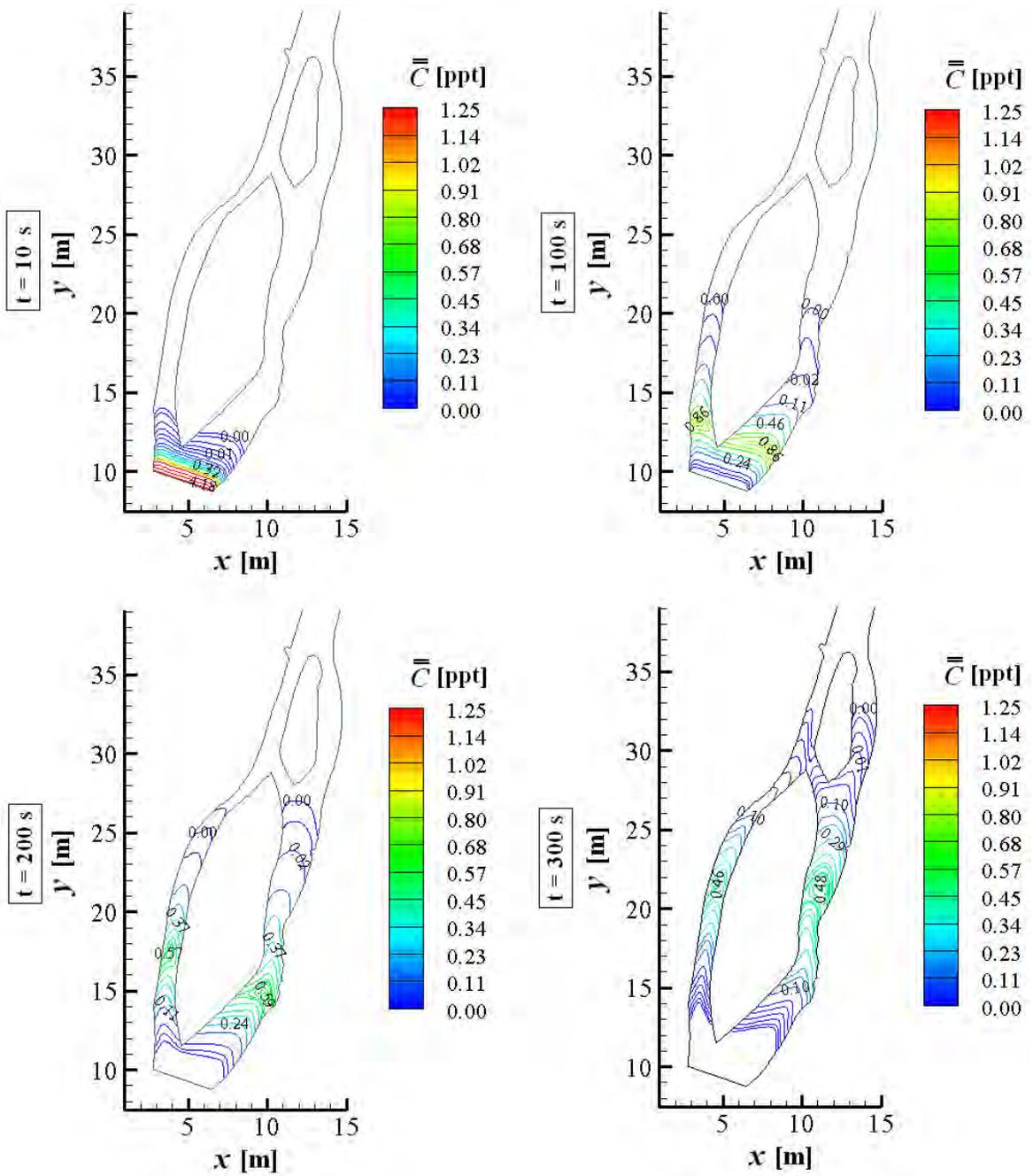


Figura 6.8: Evolución de la concentración del trazador en el tiempo.



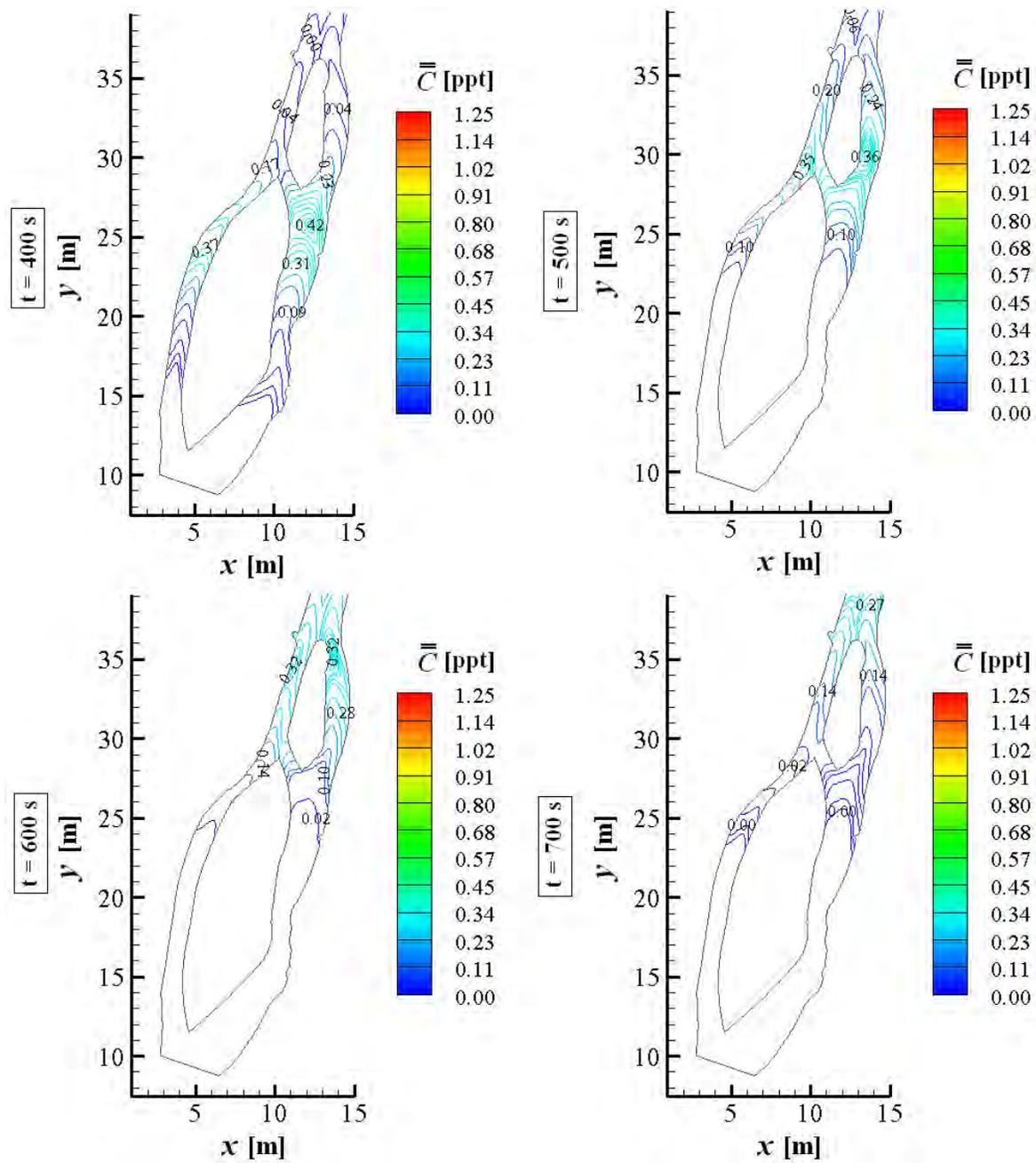


Figura 6.9: Evolución de la concentración del trazador en el tiempo (Líneas de contorno).

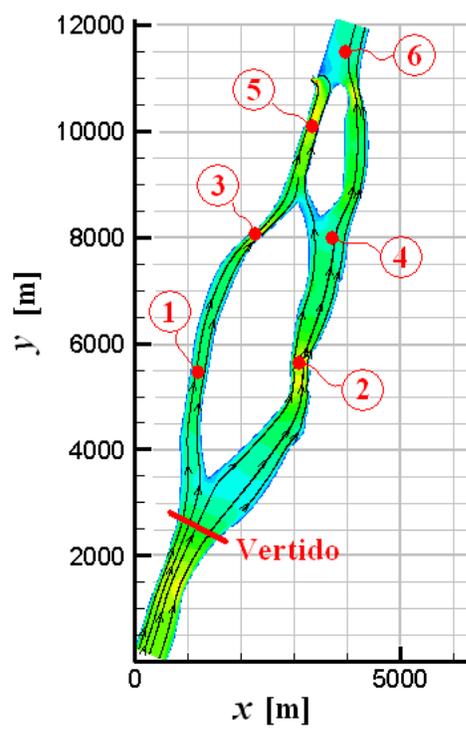


Figura 6.10: Ubicación de los puntos de medición experimental empleados.

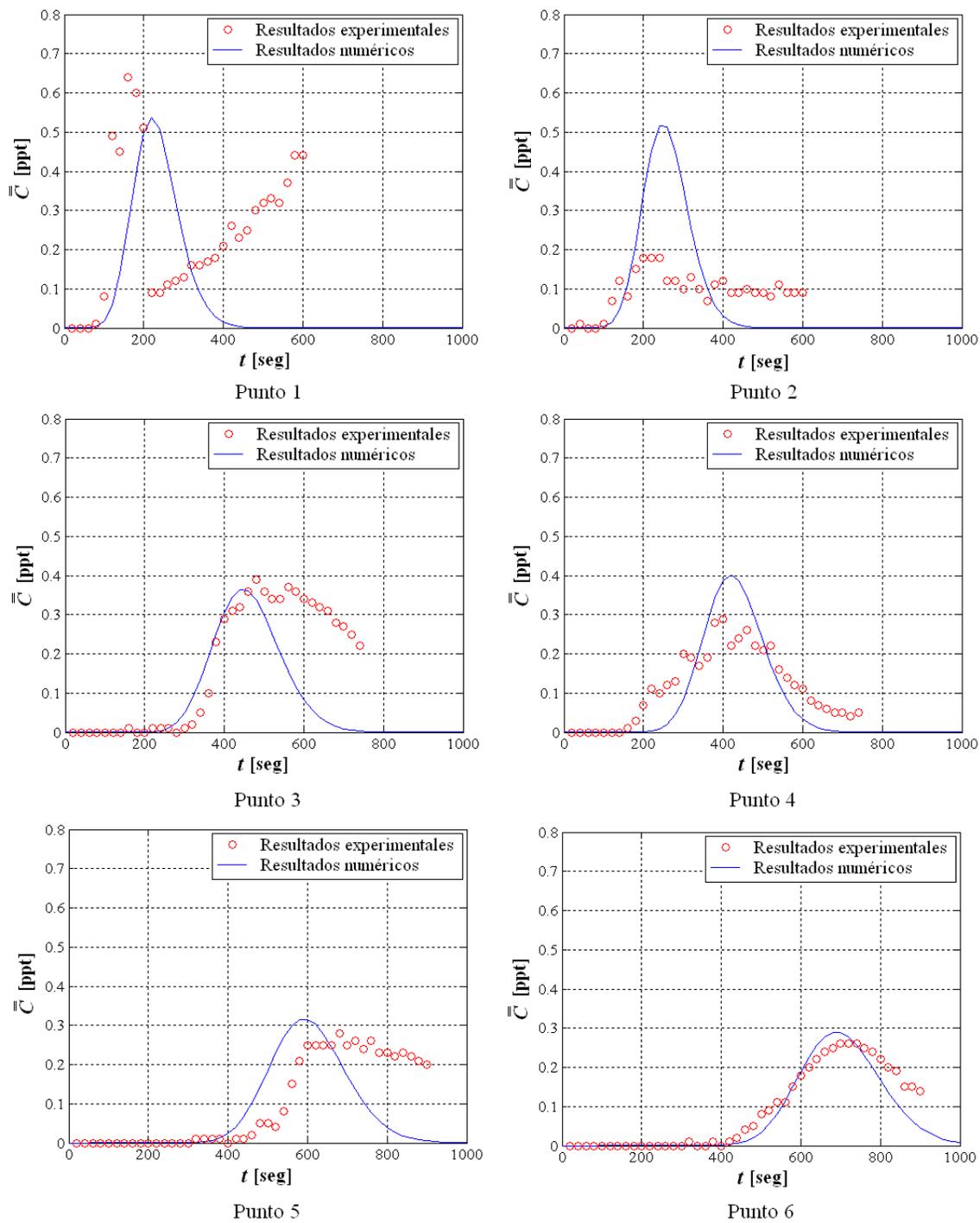


Figura 6.11: Comparación de los datos de concentración medidos experimentalmente y obtenidos a través de la solución numérica.

Conclusiones

7.1. Aportes del trabajo

El presente trabajo analiza comparativamente dos métodos empleados para la estabilización de la solución numérica de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción: el método de Petrov-Galerkin en contracorriente (*SUPG*) y el método de Galerkin sobre líneas características, los cuales son la base para el desarrollo de diversas técnicas numéricas para la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes en la dinámica de fluidos. Este análisis permitió definir un algoritmo numérico para la solución del problema de dispersión de contaminantes en ríos. El algoritmo final fue programado en lenguaje *FORTRAN* y validado a través de un ensayo de dispersión de una solución salina sobre un canal, el cual corresponde a un modelo a escala de un tramo al norte del río Magdalena.

Desde el punto de vista de las técnicas de estabilización, el presente trabajo analizó de forma detallada la formulación de cada uno de los dos métodos analizados, incorporando no solo los fenómenos de difusión y advección, estudiados en diferentes artículos y textos, sino evaluando los efectos que sobre cada una de las técnicas tiene la incorporación del término reactivo de primer orden, básico para el análisis de algunos procesos físico-químicos que suceden en el derrame de contaminantes en cuerpos de agua. En particular se generaron expresiones corregidas para el cálculo del coeficiente de perturbación α en el método *SUPG*, las cuales incorporan el número de Damköhler, que representa una relación adimensional entre los efectos reactivos y los términos de transporte. El planteamiento de esta nueva expresión para el coeficiente de perturbación permite la adición de una cantidad de difusión artificial adecuada para lograr una estabilización de la solución sin sacrificar considerablemente la exactitud de la aproximación.

El análisis comparativo de los dos métodos numéricos estudiados permitió determinar como el método de Galerkin sobre líneas características no logra estabilizar soluciones que involucren altos números de Peclet, casos en los cuales el método *SUPG* logra mejores resultados

en términos de eliminación de falsas oscilaciones. Un análisis cualitativo, así como el trazado de gráficas de convergencia de la norma del error en términos del tamaño promedio del elemento en cada uno de los casos analizados, mostró como la curva de convergencia del método basado en líneas características es muy cercana (aunque no exactamente igual) a la curva de convergencia obtenida al aplicar el método Galerkin convencional (Bubnov-Galerkin). De hecho, la amplitud de las oscilaciones numéricas en ambos métodos es muy similar. Este análisis permitió concluir que el método *SUPG* presenta mejores condiciones para la solución de problemas predominantemente advectivos, tal como el caso de dispersión de contaminantes objeto de análisis.

La validación del modelo de dispersión, realizada sobre el modelo a escala del río Magdalena ubicado en el Laboratorio de Hidráulica de la Universidad Nacional de Colombia, mostró las bondades del algoritmo numérico desarrollado, cuando se trata de analizar la concentración de contaminantes en puntos no próximos a la zona de vertido de los mismos. Las respuestas numéricas alcanzadas mostraron comportamientos similares a los observados experimentalmente, exactitudes aceptables, así como resultados libres de falsas oscilaciones o inestabilidades numéricas. Así mismo, se corroboró la importancia de la caracterización del problema en términos de los coeficientes de dispersión, los cuales dependen fuertemente de características del flujo y pueden variar a lo largo de los diferentes tramos del río. Se observó que en los puntos de descarga del contaminante, la energía introducida al fluido generan en el mismo una fuerte turbulencia, la cual deriva en altos gradientes de los coeficientes de dispersión, por lo cual las respuestas numéricas, que consideran coeficientes de dispersión constantes sobre todo el tramo del canal, se alejan de las observaciones experimentales.

7.2. Productos y publicaciones

Como producto de este trabajo se han elaborado cuatro artículos presentados a revistas de ingeniería nacionales, dos de los cuales ya han sido evaluados y publicados [40; 38], otro ya ha sido aceptado y se encuentra próximo a ser publicado [37], en tanto que el cuarto artículo aún se encuentra en revisión por parte de los jurados [36].

El estudio de la solución numérica de la ecuación de Difusión-Advección-Reacción, permitió trazar una línea de estudio sobre la formación de patrones de Turing en dominios fijos sometidos a campos advectivos, alrededor de este tema se logró la elaboración de un artículo [42], el cual ha sido sometido a la revista internacional *Applied Mathematical Modelling* y se encuentra actualmente en evaluación por parte de los jurados.

Adicionalmente, para la fecha de la versión final del presente documento, se preparan dos artículos más relacionados con el trabajo aquí mostrado. Uno de estos artículos analiza el efecto del término reactivo en el cálculo del coeficiente de perturbación empleado en el método *SUPG*. Mientras que el segundo artículo describe un modelo numérico para la pre-

dicción de la dispersión de contaminantes sobre el río Magdalena.

Por otro lado, el desarrollo del presente trabajo condujo a la elaboración de un algoritmo numérico apto para la solución numérica de ecuaciones diferenciales de Difusión-Advección-Reacción. El cual mostró un buen desempeño aún para problemas con altos números de Peclet y coeficientes variables, que lleven a zonas de advección dominante que cambian tanto espacial como temporalmente. Este algoritmo es altamente flexible y puede ser empelado para múltiples tipos de problemas que se expresen a través de la ecuación diferencial 2.1.1.

7.3. Trabajos futuros

El trabajo con la ecuación de Difusión-Advección-Reacción permite pensar en la profundización sobre múltiples líneas de aplicación, algunas de estas se listan a continuación:

- El análisis de ecuaciones con términos reactivos fuertes y de la inestabilidad que algunas formas de reacción inducen sobre los términos difusivos (inestabilidades de Turing). La incorporación de estos términos reactivos, junto con modelos de dinámica de flujos incompresibles y turbulentos, permitirá el análisis de la dispersión de contaminantes en el aire, en particular el estudio de la dispersión tridimensional de gases de combustión producidos por fuentes móviles. De la misma forma, la incorporación de los modelos de reacción química de contaminantes dispersos en cuerpos de agua, con bajos términos advectivos, permitirá analizar la formación de patrones de concentración heterogéneos o patrones de Turing, lo cual podrá anticipar las zonas de máxima concentración final de los contaminantes disueltos en el agua.
- El acople de la ecuación de dispersión de contaminantes con la ecuación de dispersión de oxígeno disuelto en el agua, a través de los procesos de reacción química entre estas dos sustancias, generará modelos para estudiar la incidencia de la mancha de contaminante en el ecosistema hídrico.
- El estudio sobre los métodos de estabilización trabajados (*SUPG* y Galerkin sobre líneas características) permite el análisis e investigación alrededor de técnicas numéricas para la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales debido a la presencia del término advectivo no lineal de velocidad, requieren el planteamiento de aproximaciones estabilizadas.
- El desarrollo de formulaciones con elementos cuadriláteros de nueve nodos en el modelo hidrodinámico, facilitará el estudio comparativo de formulaciones estabilizadas con elementos de primer orden y formulaciones no estabilizadas con elementos de orden superior. Así mismo se plantea el estudio de las formulaciones estabilizadas para elementos de continuidad C^1 .

Bibliografía

- [1] V. Alavian. Dispersion tensor in rotating flows. *Journal of Hydraulic Engineering*, 112(8):771–777, 1986.
- [2] E. Ani, S. Wallis, A. Kraslawski, and P. Agachi. Development, calibration and evaluation of two mathematical models for pollutant transport in a small river. *Environmental Modelling and Software*, 24(10):1139–1152, 2009.
- [3] R. Araya, E. Behrens, and R. Rodríguez. An adaptive stabilized finite element scheme for the advection-reaction-diffusion equation. *Applied Numerical Mathematics*, 54:491–503, 2005.
- [4] R. Araya, E. Behrens, and R. Rodríguez. Error estimators for advection-reaction-diffusion equations based on the solution of local problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 206:440–453, 2007.
- [5] M. Ardes, F. Busse, and J. Wicht. Thermal convection in rotating spherical shells. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 99:55–67, 1997.
- [6] I. Babuska, F. Ihlenburg, E. Paik, and S. Sauter. A generalized finite element method for solving the helmholtz equation in two dimensions with minimal pollution. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 128:325–359, 1995.
- [7] C. Baiocchi, F. Brezzi, and L. Franca. Virtual bubbles and galerkin/least-square type methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 105:125–141, 1993.
- [8] Y. Balkarei, A. GrigorYants, Y. Rhzanov, and M. Elinson. Regenerative oscillations, spatial-temporal single pulses and static inhomogeneous structures in optically bistable semiconductors. *Optics Communications*, 66:161–166, 1988.
- [9] M. Baurmanna, T. Gross, and U. Feudel. Instabilities in spatially extended predator-prey systems: Spatio-temporal patterns in the neighborhood of turing-hopf bifurcations. *Journal of Theoretical Biology*, 245:220–229, 2007.

- [10] M. Bercovier, O. Pironneau, and V. Sastri. Finite elements and characteristics for some parabolic/hyperbolic problems. *Applied Maths. and Modeling*, 7:89–96, 1983.
- [11] A. Bermudez, J. Durany, M. Posse, and C. Vázquez. An upwind method for solving transport diffusion reaction systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 28(9):2021–2039, 1989.
- [12] M. Berzins. Temporal error control for convection-dominated equations in two space dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(3):558–580, 1995.
- [13] M. Boufadel, K. Du, V. Kaku, and J. Weaver. Lagrangian simulation of oil droplets transport due to regular waves. *Environmental Modelling and Software*, 22:978–986, 2007.
- [14] F. Brezzi, D. Marini, and A. Russo. Applications of the pseudo residual-free bubbles to the stabilization of convection-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166:51–63, 1998.
- [15] A. Brooks and T. Hughes. Stream upwind petrov-galerkin formulations for convection dominated flow with particular emphasis on the incompressible navier stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32:199–259, 1982.
- [16] X. Chao, N. Shankar, and H. Cheong. Two- and three-dimensional oil spill model for coastal waters. *Ocean Engineering*, 28:1557–1573, 2001.
- [17] M. Chaplain, A. Ganesh, and I. Graham. Spatio-temporal pattern formation on spherical surfaces: Numerical simulation and application to solid tumor growth. *Journal of Mathematical Biology*, 42:387–423, 2001.
- [18] J. Chrispell, V. Ervin, and E. Jenkins. A fractional step θ -method for convection-diffusion problems. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 333:204–218, 2007.
- [19] I. Christie, D. Griffiths, and O. Zienkiewicz. Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10:1389–1396, 1976.
- [20] R. Clark. *Marine Pollution*. Gookcraft Ltd., 3 edition, 1992.
- [21] B. Cockburn, G. Karniadakis, and C. Shu. *Discontinuous Galerkin Methods, Theory, Computational and Application*. Ed. Springer, 2000.
- [22] R. Codina. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 156:185–210, 1998.

- [23] R. Courant, E. Isaacson, and M. Rees. On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite differences. *Communications On Pure and Applied Mathematics*, V:243–255, 1952.
- [24] J. Crank and P. Nicolson. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Advances in Computational Mathematics*, 6:207–226, 1996.
- [25] F. Crauste, M. Lhassan, and A. Kacha. A delay reaction-diffusion model of the dynamics of botulinum in fish. mathematical biosciences. *Applied Mathematical Modelling*, 216:17–29, 2008.
- [26] W. Czernuszenko. Dispersion of pollutants in rivers. *Journal des Sciences Hydrologiques*, 32:59–67, 1987.
- [27] Z. Deng and H. Jung. Scaling dispersion model for pollutant transport in rivers. *Environmental Modelling and Software*, 24(5):627–631, 2009.
- [28] Z. Deng, V. Singh, and L. Bengtsson. Longitudinal dispersion coefficient in single channel streams. *Journal of Hydraulic Engineering*, 128(10):901–916, 2001.
- [29] A. Elhakeem, W. Elshorbagy, and R. Chebbi. Oil spill simulation and validation in the arabia (persian) gulf with special reference to the uae coast. *Water Air Soil Pollut*, 184:242–254, 2007.
- [30] L. Ferragut, M. Asensio, and S. Monedero. A numerical method for solving convection-reaction-diffusion multivalued equations in fire spread modelling. *Advances in Engineering Software*, 38:366–371, 2007.
- [31] S. Ferreira, M. Martins, and M. Vilela. Reaction-diffusion model for the growth of avascular tumor. *Physical Review*, 65(2):1–8, 2002.
- [32] B. Fisher. The mechanics of dispersion in natural streams. *Journal of Hydraulic Division*, 93(6):187–216, 1967.
- [33] L. Franca, S. Frey, and T. Hughes. Stabilized finite element methods: I. application to advective difusive model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Enginnering*, 95:253–276, 1992.
- [34] H. Frederik, P. Maini, A. Madzvamuse, A. Wathen, and T. Sekimura. Pigmentation pattern formation in butterflies: experiments and models. *Comptes Rendus Biologies*, 326:717–727, 2003.
- [35] W. Fu, H. Fu, K. Skott, and M. Yang. Modeling the spill in the songhua river after the explosion in the petrochemical plant in jilin. *Environmental Science and Pollution Research*, 15(3):178–181, 2008.

- [36] C. Galeano, J. Mantilla, and D. Garzón. Análisis de la estabilidad espacio-temporal del método petrov-galerkin en contracorriente para la ecuaciones de difusión-advección. *Revista DYNA (Facultad de Minas de la Universidad Nacional de Colombia. Sede Medellín)*, Article in press, 2009.
- [37] C. Galeano, J. Mantilla, and D. Garzón. Comparación del método de líneas características y el método petrov galerkin en contracorriente para problemas de advección dominante. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, Article in press, 2009.
- [38] C. Galeano, J. Mantilla, and D. Garzón. Implementación del método de estabilización de petrov-galerkin en contracorriente para la solución numérica de problemas altamente advectivos. *Revista Ingeniería e Investigación*, 29(2):81–87, 2009.
- [39] J. García-Aznar, J. Kuiper, M. Gómez-Benito, M. Doblaré, and J. Richardson. Computational simulation of fracture healing: Influence of interfragmentary movement on the callus growth. *Journal of Biomechanics*, 40:1467–1476, 2007.
- [40] D. Garzón, C. Galeano, and C. Duque. Aplicación del método petrov-galerkin como técnica para la estabilización de la solución en problemas unidimensionales de convección-difusión-reacción. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 47:73–90, 2009.
- [41] D. Garzón-Alvarado. *Simulación de procesos de reacción-difusión: Aplicación a la morfogénesis del tejido óseo*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, 2007.
- [42] D. Garzón-Alvarado, J. Mantilla, and C. Galeano. Turing pattern formation for reaction-convection-diffusion systems in fixed domains submitted to toroidal velocity fields. *Applied Mathematical Modelling*, Article in press.
- [43] W. Guo and Y. Wang. A numerical oil spill model based on a hybrid method. *Marine Pollution Bulletin*, 58:726–734, 2009.
- [44] G. Guymon, B. Scott, and L. Herrmann. A general numerical solution of the two dimensional diffusion-convection equation by finite element method. *Water Resources Res.*, 6:1611–1617, 1970.
- [45] I. Harari and T. Hughes. Stabilized finite element methods for steady advection-diffusion with production. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 115:165–191, 1994.
- [46] O. Hirayama and R. Takaki. Thermal convection of a fluid with temperature-dependent viscosity. *Fluid Dynamics Research*, 12(1):35–47, 1988.
- [47] T. Hughes and A. Brooks. A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. *Finite Element Method for Convection Dominated Flows (ASME)*, 34:19–35, 1979.

- [48] T. Hughes, L. Franca, and M. Balestra. A new finite element formulation for computational and fluid dynamics: V. circumventing the babuska-brezzi condition: a stable petrov-galerkin formulation of the stokes problem accommodating equal-order interpolations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 59:85–99, 1986.
- [49] T. Hughes, L. Franca, and G. Hulbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: Viii. the galerkin/least-squares method for advective diffusive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 73:173–189, 1989.
- [50] T. Hughes, L. Franca, G. Hulbert, Z. Johan, and F. Sakhil. The galerkin least square method for advective diffusion equations. *Recent Developments in Computational Fluid Mechanics, AMD 94-ASME*, pages 1–20, 1988.
- [51] T. Hughes, M. Mallet, and A. Mizukami. A new finite element formulation for computational fluid dynamics. ii: Beyond supg. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 54(3):341–355, 1986.
- [52] R. Illner, S. McCollum, T. VanRoode, and C. Bohun. *Case Studies in Mathematical Modelling*. American Mathematical Society, 2005.
- [53] D. Jaiswal, A. Kumar, N. Kumar, and R. Yadav. Analytical solutions for temporally and spatially dependent solute dispersion of pulse type input concentration in one-dimensional semi-infinite media. *Journal of Hydro-environment Research*, 2(4):254–263, 2009.
- [54] C. Johnson, U. Navert, and J. Pitkaranta. Finite element methods for linear hyperbolic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 45:285–312, 1984.
- [55] S. Kashefipour and A. Falconer. Longitudinal dispersion coefficients in natural channels. pages 95–102, 2002.
- [56] S. Kondo and R. Asai. A reaction-diffusion wave on the skin of the marine anglefish, pomacanthus. *Nature*, 376:765–768, 1995.
- [57] K. Korotenko, R. Mamedov, and C. Mooers. Prediction of the transport and dispersal of oil in the south caspian sea resulting from blowouts. *Environmental Fluid Mechanics*, 1:383–414, 2002.
- [58] V. Krinsky. *Self-organisation: Auto-Waves and structures far from equilibrium*. Ed. Springer, 1984.
- [59] M. Lee and I. Seo. Analysis of pollutant transport in the han river with tidal current using a 2d finite element model. *Journal of Hydro-environment Research*, 1(1):30–42, 2007.

- [60] Z. Li, J. Huang, and J. Li. Preliminary study on longitudinal dispersion coefficient for the gorges reservoir. 1998.
- [61] J. Lir and T. Lin. Visualization of roll patterns in rayleigh-bénard convection of air in rectangular shallow cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44:2889–2902, 2001.
- [62] S. Lonin. Modelación numérica de derrames de crudo y un concepto del problema inverso. *Boletín científico CCCP*, 19:15–22, 2001.
- [63] S. Lonin, J. Arduckia, C. Parra, and R. Morales. *Contribuciones en ciencias del mar en Colombia. Investigación y desarrollo de territorios promisorios*, chapter Modelo de circulación oceánica con asimilación de datos para el caribe, aplicado en derrame de hidrocarburos, pesquería y búsqueda y rescate. Unibiblos, Universidad Nacional de Colombia, 1 edition, 2004.
- [64] S. Lonin and C. Parra. Predicción del comportamiento de las manchas de hidrocarburo derramado en el mar. *Boletín científico CIOH*, 23:6–16, 2005.
- [65] A. Madzvamuse. A numerical approach to the study of spatial pattern formation in the ligaments of arcoid bivalves. *Bulletin of Mathematical Biology*, 64:501–530, 2002.
- [66] A. Madzvamuse, A. Wathen, and P. Maini. A moving grid finite element method applied to a model biological pattern generator. *Journal of Computational Physics*, 190:478–500, 2003.
- [67] A. Madzvamuse, A. Wathen, and P. Maini. A moving grid finite element method applied to a model biological pattern generator. *Journal of Computational Physics*, 190:478–500, 2003.
- [68] H. Meinhardt. *Models of Biological Pattern Formation*. Ed. Academic Press, 1982.
- [69] R. Morales. Aplicación de la modelación numérica durante la emergencia de derrame por hidrocarburos (estudio de caso derrame b/t saetta). *Boletín científico CIOH*, 23:17–25, 2005.
- [70] K. Morton. Generalised galerkin methods for hyperbolic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 52:847–871, 1985.
- [71] J. Murray. A prepattern formation mechanism for animal coat markings. *Journal of Theoretical Biology*, 88:161–199, 1981.
- [72] T. Nozakura and S. Ikeuchi. Formation of dissipative structures in galaxies. *The Astrophysical Journal*, 279:40–52, 1984.
- [73] E. Oñate. Derivation of stabilized equations for numerical solution of advective diffusive transport and fluid flow problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151:233–265, 1998.

- [74] B. Pimpunchat, W. Sweatman, G. Wake, W. Triampo, and A. Parshotam. A mathematical model for pollution in a river and its remediation by aeration. *Applied Mathematics Letters*, 22:304–308, 2009.
- [75] O. Pironneau. On the transport diffusion algorithm and its applications to the navier-stokes equations. *Numerische Mathematik*, 38:309–332, 1982.
- [76] O. Pironneau, J. Liou, and T. Tezduyar. Characteristic galerkin and galerkin least squares space time formulations for the advection diffusion equation with time dependent domains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 100:117–141, 1992.
- [77] M. Reed, O. Johansen, P. Brandvika, P. Daling, A. Lewis, R. Fiocco, D. Mackay, and R. Prentki. Oil spill modeling towards the close of the 20th century: Overview of the state of the art. *Spill Science and Technology Bulletin*, 5(1):3–16, 1999.
- [78] H. Riahi-Madvar, S. Ayyoubzadeha, E. Khadangib, and M Ebadzadeh. An expert system for predicting longitudinal dispersion coefficient in natural streams by using anfis. *Expert Systems with Applications*, 36(4):8589–8596, 2009.
- [79] O. Richter. Modelling dispersal of populations and genetic information by finite element methods. *Environmental Modelling and Software*, 23(2):206–214, 2008.
- [80] R. Rieben, D. White, B. Wallin, and J. Solberg. An arbitrary lagrangian-eulerian discretization of mhd on 3d unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 226(1):534–570, 2007.
- [81] F. Rossi, S. Ristori, M. Rustici, N. Marchettini, and E. Tiezzi. Dynamics of pattern formation in biomimetic systems. journal of theoretical biology. *Applied Mathematical Modelling*, 255:404–412, 2008.
- [82] B. Rothschild and J. Ault. Population-dynamic instability as a cause of patch structure. *Ecological Modelling*, 93:237–239, 1996.
- [83] A. Russo. Bubble stabilization of the finite element method for the linearized incompressible navier-stokes equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 132:335–343, 1996.
- [84] T. Sekimura, A. Madzvamuse, A. Wathen, and P. Maini. A model for colour pattern formation in the butterfly wing of papilio dardanus. *Proceedings of the Royal Society*, B 26:851–859, 2000.
- [85] I. Seo and T. Cheong. Predicting longitudinal dispersion coefficient in natural stream. *Journal of Hydraulic Engineering*, 124(1):25–32, 1998.
- [86] W. Shyy, H. Udaykumar, M. Rao, and R. Smith. *Computational Fluid Dynamics with Moving Boundaries*. Dover, 1 edition, 2007.

- [87] R. Smith. Optimal and near-optimal advection-diffusion finite-difference schemes iii. black-scholes equation. *Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 456:1019–1028, 2000.
- [88] G. Southworth. The role of volatilization in removing polycyclic aromatic hydrocarbons from aquatic environments. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 21:507–511, 1979.
- [89] D. Spalding. A novel finite difference formulation for differential equations involving both first and second derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 4:551–559, 1972.
- [90] M. Stynes. Steady-state convection-diffusion problems. *Acta Numerica*, pages 445–508, 2005.
- [91] K. Suh, K. Kim, S. Jung, and J. Lee. Determination of dispersion coefficients using radioisotope data in river environment. *Applied Radiation and Isotopes*, 67(7):1499–1502, 2009.
- [92] C. Tejada and F. Afanador. Evaluación del riesgo debido a un derrame de hidrocarburos en la bahía de tumaco. *Boletín científico CCCP*, 10:56–82, 2003.
- [93] T. Tirabassi, A. Tiesi, D. Buske, M. Vilhena, and D. Moreira. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two dimensional advection diffusion equation. *Atmospheric Environment*, 43:2221–2227, 2009.
- [94] P. Tkalich, K. Gin, and E. Chan. Numerical simulation of oil spill combating techniques. pages 1–9, 1999.
- [95] A. Trancoso, F. Braunschweig, P. Leitão, M. Obermann, and R. Neves. An advanced modelling tool for simulating complex river systems. *Science of The Total Environment*, 407(8):3004–3016, 2009.
- [96] S. Trapp and B. Harland. Field test of volatilization models. *Environmental Science and Pollution Research*, 2(3):164–169, 1995.
- [97] A. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society*, 237:37–72, 1952.
- [98] P. Vethamony, K. Sudheesh, M. Babu, S. Jayakumar, R. Manimurali, A. Saran, L. Sharma, B. Rajan, and M. Srivastava. Trajectory of an oil spill off goa, eastern arabian sea: Field observations and simulations. *Environmental Pollution*, 148(2):438–444, 2007.
- [99] H. Wang, H. Dahle, R. Ewing, M. Espedal, R. Sharpley, and S. Man. An ellam scheme for advection-diffusion equations in two dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20(6):2160–2194, 1979.

- [100] S. Wang, Y. Shen, Y. Guo, and J. Tang. Three-dimensional numerical simulation for transport of oil spills in seas. *Ocean Engineering*, 35:503–510, 2008.
- [101] S. Wang, Y. Shen, and Y. Zheng. Two-dimensional numerical simulation for transport and fate of oil spills in seas. *Ocean Engineering*, 32:1556–1571, 2005.
- [102] W. Whitman. A preliminary experimental confirmation of the two-film-theory of gas adsorption. *Chem. Metall. Eng.*, 29:146–148, 1923.
- [103] J. Xin and J. Flaherty. Viscous stabilization of discontinuous galerkin solutions of hyperbolic conservation laws. *Applied Numerical Mathematics*, 56:444–458, 2006.
- [104] F. Yi, J. Wei, and J. Shi. Bifurcation and spatiotemporal patterns in a homogeneous diffusive predator-prey system. *Journal of Differential Equations*, Article in Press:–, –.
- [105] F. Yi, J. Wei, and J. Shi. Bifurcation and spatio temporal patterns in a homogeneous diffusive predator-prey system. *Journal of Differential Equations*, 246:1944–1977, 2009.
- [106] L. Zhang and S. Liu. Stability and pattern formation in a coupled arbitrary order of autocatalysis system. *Applied Mathematical Modelling*, 33:884–896, 2009.
- [107] O. Zienkiewicz and R. Codina. A general algorithm for compressible and incompressible flow: Part i. the split, characteristic based scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20:869–885, 1996.
- [108] O. Zienkiewicz, R. Gallagher, and P. Hood. *Newtonian and non-Newtonian viscous incompressible flow. Temperature induced flows and finite elements solutions. The Mathematics of Finite Elements and Applications*. Ed. Academic Press, 1975.
- [109] O. Zienkiewicz, J. Heinrich, P. Huyakorn, and A. Mitchel. An upwind finite element scheme for two dimensional convective transport equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 11:131–144, 1977.
- [110] O. Zienkiewicz, R. Löhner, K. Morgan, and S. Nakazawa. Finite elements in fluid mechanics: a decade of progress. *Finite Elements in Fluids*, 5:1–26, 1984.
- [111] O. Zienkiewicz, R. Löhner, K. Morgan, and S. Nakazawa. Finite elements in fluids mechanics: a decade of progress. *Finite Elements in Fluids*, 5:1–26, 1984.
- [112] O. Zienkiewicz and R. Taylor. *Finite Element Method Vol. 3*. Ed. Butterworth-Heinemann College, 2000.
- [113] O. Zienkiewicz, R. Taylor, and P. Nithiarasu. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 6 edition, 2005.

